

Zeitschrift: Helvetica Physica Acta
Band: 58 (1985)
Heft: 5

Vereinsnachrichten: Bericht über die Frühjahrstagung der Schweizerischen Physikalischen Gesellschaft an der Universität Freiburg vom 28.-29. März 1985

Autor: [s.n.]

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. [Mehr erfahren](#)

Conditions d'utilisation

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. [En savoir plus](#)

Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. [Find out more](#)

Download PDF: 16.09.2025

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>

BERICHT UEBER DIE FRUEHJAHRSTAGUNG DER SCHWEIZERISCHEN PHYSIKALISCHEN GESELLSCHAFT AN DER UNIVERSITAET FREIBURG VOM 28. - 29. MAERZ 1985

I. Administrativer Teil

Vorstand der SPG:

Prof. J. Kern
Prof. P. Minkowski
Dr. B. Vaucher

Präsident
Vizepräsident
Sekretär

Dr. J.P. Egger
Prof. P. Martinoli
Dr. M. Siegrist
Dr. R. Viollier
Prof. R. Dändliker
Prof. H.J. Gerber
Prof. I. Zschokke

Kern- und Teilchenphysik
Kondensierte Materie
Angewandte Physik
Theoretische Physik
Wissenschaftspolitik
Helvetica Physica Acta
I.U.P.A.P.

Rechnungsrevisoren:

Prof. W. Czaja
Prof. L. Schellenberg

Stellenvermittlung der SPG

Prof.Dr. Fritz K. Kneubühl
Labor für Festkörperphysik
ETH Hönggerberg
CH-8093 Zürich

Tel. 01/377 23 40

Helvetica Physica Acta

Prof. Ph.A. Martin, Rédacteur
Institut de Physique Théorique
EPFL/PHB
CH-1015 Lausanne

Tel. 021/47 34 13

Sekretariat:

Schweizerische Physikalische Gesellschaft
Physikinstitut der Universität
Pérolles
CH-1700 Freiburg

Tel. 037/82 61 11 / 82 62 30

Neue Mitglieder (seit dem 24. August 1984)

ANDREONI-KAY Wanda (Lausanne), APTER Robert (Genève), AZAM Saber (Lausanne), BERDOZ Alain (Neuchâtel), BLATTER Johann (Baden), BLOCH Paul (Lausanne), BRIGUET Véronique (Zürich), BUGMANN Guido (Genève), DAETWYLER Martin (Bern), GERBER T. (Enschede/NL), GUGLER Claude (Fribourg), KAY Bernard (Zürich), KRAUS Norbert (Villigen), KUETTEL Olivier (Freiburg), MAHLER Hansjürg (Männedorf), MALI Mihael (Zürich), MOSER Myriam (Zürich), MUSCHIETTI Laurent (Boulder, USA), PERRY Anthony J. (Zürich), RENAUD Philippe (Lausanne), SAHAROUI Cherif (Lausanne), SALICIO José-Luis (Fribourg), SCHMID Beat (Würenlingen), Thuillard Marc (Bern), VOIT Eugen (Zürich), WEBER Jean-Claude (Zürich).

Damit zählt die Gesellschaft zurzeit 1205 Einzelmitglieder, 9 Gesellschaften und 14 Bibliotheken als Kollektivmitglieder.

Die Generalversammlung fand am 28. März 1985 um 17.30 Uhr statt.

Protokoll

Anwesend: 30 Personen

1. Protokoll der Generalversammlung vom 4. Oktober 1984 in Zürich

Das Protokoll wird ohne Einwände genehmigt.

2. Mitteilungen des Vorstandes

- "Zukunft der Physik an den Eidg. Technischen Hochschulen"
Der Vorstand und die Wissenschaftspolitische Kommission haben eine Stellungnahme zu diesem Bericht erarbeitet. Diese Stellungnahme ist auf dem Sekretariat der SPG erhältlich.
- Aktion zur Befreiung von Orlov und Shcharansky
In dieser Angelegenheit hat die Schweizerische Naturforschende Gesellschaft (SNG) im Namen der Schweizer Wissenschaftler einen offenen Brief an die Botschaft der UdSSR in Bern gerichtet.
- I.U.P.A.P.
Die noch ausstehenden Beiträge der letzten Jahre an die I.U.P.A.P. sind jetzt von der SNG bezahlt worden. Da diese Zahlung vom Senat noch nicht genehmigt war, brauchte es eine Bürgschaft, welche von der SPG übernommen wurde. Damit sollte auch das Interesse unserer Gesellschaft an der I.U.P.A.P. bewiesen werden. Der Senat der SNG wird im Mai 1985 zu diesen Beitragszahlungen erneut Stellung nehmen. Der Zentralvorstand der SNG will die Beiträge 1985 noch einmal übernehmen, aber auch die Mitgliedschaft bei den einzelnen internationalen Vereinigungen überprüfen.
- Ankündigung von Tagungen
Die Herbsttagung 1985 wird im Rahmen der Jahresversammlung der SNG vom 3. - 5. Oktober 1985 in Biel stattfinden. Einsendeschluss für die Kurzbeiträge ist der 9. August 1985.
Die Frühjahrstagung 1986 wird am 10./11. April 1986 in Neuenburg stattfinden.
- Beiträge an die Organisation von Konferenzen
Aufgrund der beschränkten Mittel kann unsere Gesellschaft nur bescheidene Beiträge gewähren. Frühzeitig eingereichte und vollständige Gesuche können aber an die SNG weitergeleitet werden. Eine Anleitung mit den Vorschriften der SNG wird dem nächsten Versand an alle Mitglieder beigelegt werden.
- Neue Sektion "Physics Education"
Die durchgeführte Vernehmlassung bei für solche Fragen interessierten Persönlichkeiten hat zwar einige

skeptische und sogar ablehnende, aber doch mehrheitlich zustimmende Reaktionen gefunden. Aufgrund dieser Ergebnisse hat der Vorstand beschlossen, die Idee von Prof. Kern weiter zu verfolgen und Prof. S. Steinemann beauftragt, die nötigen Schritte zu unternehmen.

- Neue Zeitschrift "Europhysics Letters"

Nach gründlicher Prüfung der Bedingungen und aufgrund der Vollmacht von der Generalversammlung vom 6. April 1984 in Bern hat sich der Vorstand für eine Beteiligung an der Herausgabe dieser Zeitschrift mit einem Kapital von SFr. 15'000.-- entschieden. Die Zahlung ist im Januar 1986 fällig, ein Gesuch an die SNG, diese internationale Zusammenarbeit zu unterstützen, ist gestellt.

3. Jahresrechnung 1984

Der Sekretär-Kassier erläutert die Jahresrechnung 1984, welche mit einem Einnahmenüberschuss von Fr. 6'578.95 abschliesst. Das positive Rechnungsergebnis ist eine Folge der einmaligen Verrechnung von Autorenbeiträgen im Jahr 1984 für drei Tagungen (Einführung des "camera-ready-Verfahrens"), Mehreinnahmen aus Werbeaktionen und nicht getätigten Ausgaben, u.a. eingesparte Druckkosten für Abstractformulare (Geschenk vom Birkhäuser-Verlag).

Prof. Czaja liest den Revisorenbericht vor und empfiehlt der Versammlung die Annahme der Jahresrechnung. Die Jahresrechnung 1984 wird von der GV einstimmig genehmigt.

Der Sekretär erläutert das Budget 1985, das durch einmalige ausserordentliche Ausgaben gekennzeichnet ist (Herausgabe des Katalogs Physikalische Forschung in der Schweiz 1985 und Wechsel des Sekretariats). Dank erhöhten Mehreinnahmen ist für 1985 lediglich ein Defizit von Fr. 6'000.- budgetiert, ein Betrag welcher der Eigenleistung der SPG für den Katalog 1985 entspricht.

4. Mitteilungen der Fachgruppenvertreter und der Kommissionspräsidenten

- Stellenvermittlung der SPG

In Vertretung von Prof. Kneubühl erläutert der Sekretär die Statistik zur Stellenvermittlung der Schweizerischen Physikalischen Gesellschaft für das Jahr 1984. Im letzten Jahr wurden drei Zirkulare versandt und jedesmal gab es mehr Stellenangebote als Stellensuchende. Der Stellenmarkt für Physiker in der Schweiz ist praktisch ausgetrocknet, es fehlen sowohl in der Industrie, wie auch an den Hochschulen die Experimentalphysiker.

- Helvetica Physica Acta

Die Jahresrechnung 1984 ist ausgeglichen. Prof. Ph. Martin teilt mit, dass auch 1985 durch Anpassung der Seitenzahl eine ausgeglichene Jahresrechnung erreicht werden soll. Das Redaktionskomitee ist aber bereit, für eine allfällige zusätzliche Publikation von besonders hohem wissenschaftlichem Wert ein massvolles Defizit zu riskieren.

Dank dem "camera ready Verfahren" konnten die Beiträge der Herbsttagung vor der nächsten Tagung veröffentlicht werden. Vol. 57 umfasst ausserdem 25 Autorenbeiträge und neun Manuskripte des Symposiums "Atome und Moleküle" anlässlich der Jahrestagung 1983 der SNG. Die Publikation anderer interessanter Konferenzbeiträge wie die "Stückelberg Memorial Lectures" (Juni 1985) und die "Proceedings des Gwatt Workshops on Broken Symmetry" (Oktober 1985) sind vorgesehen.

5. Wahlen

- Wahl des Vorstandes der SPG

Für die Periode 1985-1987 muss der Vorstand neu bestellt werden. Von der GV einstimmig gewählt werden:

Prof. P. Minkowski, Bern	Präsident
Prof. S. Steinemann, Lausanne	Vizepräsident
Prof. P. Grieder, Bern	Sekretär

Unter Verdankung der geleisteten Dienste überreicht der Präsident dem scheidenden Sekretär-Kassier im Namen der Mitglieder ein Geschenk. Dr. Vaucher dankt für die anerkennenden Worte und das unerwartete Geschenk. Er betont, dass er es trotz der vielen Arbeit nicht bereue, das Amt übernommen zu haben, dass er aber auch froh sei, es heute weitergeben zu können.

Dr. J.P. Egger (Kern- und Teilchenphysik), Prof. P. Martinoli (Festkörperphysik), Prof. R. Dändliker (Wissenschaftspolitik) und Prof. H.J. Gerber (Helvetica Physica Acta) werden für ein weiteres Jahr im Amt bestätigt. Anstelle des im Ausland lebenden Dr.R. Viollier (Theoretische Physik) wird Dr. D.Ryter gewählt.

- Wahl des EPS Delegierten

Anstelle des zurücktretenden Prof.J.Kern wird Prof. S. Steinemann, neuer Vizepräsident der SPG, als Delegierter der SPG in den Council der EPS einstimmig gewählt.

- I.U.P.A.P.

Das Landeskomitee der I.U.P.A.P. wird seit 1.1.1985 neu von Frau Prof.I.Zschokke präsidiert.

6. Stückelberg-Preis

Die Idee, einen Stückelberg-Preis zu schaffen, wird diskutiert. Die Generalversammlung billigt die Gründung einer Arbeitsgruppe unter der Leitung von Prof. M. Peter mit dem Auftrag, Geldgeber für die Finanzierung des Preises zu finden und ein Reglement auszuarbeiten.

7. Verschiedenes

Der neue Vizepräsident, Prof.S.Steinemann, dankt in Vertretung des abwesenden Präsidenten Prof.P.Minkowski, dem scheidenden Präsidenten Prof.J.Kern für den Einsatz während den letzten zwei Jahren.

Schluss der Sitzung 18.30 Uhr.

II. Wissenschaftlicher Teil

Zentrales Thema der ersten beiden Hauptvorträge waren die gegenwärtigen Forschungsziele, Methoden und Ergebnisse der Kernphysik:

Prof. M. Brack, Universität Regensburg

Progrès récents en physique nucléaire théorique à basse énergie

Prof. I. Sick, Universität Basel

"Elektron - Kern Streuung und Scaling"

Die Beobachtung von Scaling Phänomenen in der inelastischen Elektronenstreuung - die Tatsache, dass Observable, die von mehreren Variablen abhängen auf eine einzige Funktion reduziert werden können - erlaubt weitgehende Schlussfolgerungen über Kerneigenschaften und Reaktionsmechanismus. Von speziellem Interesse sind Fragen nach dem Verhalten von Nukleonen bei kleinen Internukleon-Abständen, Komponenten hohen Impulses und der Aenderung von Nukleonen durch das nukleare Medium.

In einem dritten Hauptvortrag berichtete Dr. H. Rohrer, Träger des Hewlett Packard Preises 1984 (zusammen mit G. Binnig), über Mikroskopie und Spektroskopie mit dem Rastertunnelmikroskop:

"Mikroskopie und Spektroskopie im atomaren Bereich:

Das Rastertunnelmikroskop"

Das Rastertunnelmikroskop erlaubt ein kontaktloses Abtasten elektronischer Eigenschaften von Oberflächen. Wir erhalten damit sowohl die Topographie als auch die "Farbe" (irgendeine Eigenschaft, die den Tunnelstrom beeinflusst) von Oberflächen mit atomarer Auflösung. Die Methode arbeitet im UHV, bei Normal-Bedingungen, wie auch in Flüssigkeiten. Die Anwendungsmöglichkeiten sind zahlreich:
Oberflächenphysik, Biologie, industrielle Oberflächen u.a.m.

Zur Frühjahrstagung 1985 wurden 126 Kurzbeiträge eingereicht. Diese Beiträge, welche auf den folgenden Seiten abgedruckt sind, verteilten sich auf die einzelnen Fachgruppen wie folgt:

- Physik der kondensierten Materie (KOND) 60 Kurzvorträge
- Angewandte Physik (ANDO): 43 Kurzvorträge und 2 Posterbeiträge
- Kern- und Teilchenphysik (KETE): 15 Kurzvorträge
- Theoretische Physik (THEO) 6 Kurzvorträge

Freiburg, im April 1985

Der Präsident

J. Kern

Der Sekretär

B. Vaucher

PHYSIK DER KONDENSIERTEN MATERIE

KOND I : Transporteigenschaften, Phononen

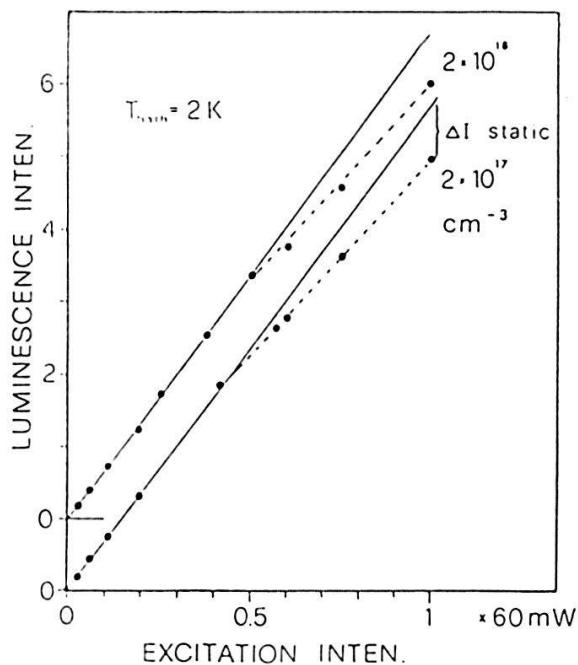
NONLINEARITY OF THE PHOTOLUMINESCENCE RESPONSE OF AgBr:I
DUE TO OPTICAL HEATING

R. Bertato and W. Czaja, Institut de Physique Appliquée-EPFL,
CH-1015 LAUSANNE, Switzerland

Abstract : The iodine related photoluminescence response of AgBr:I, under UV excitation, shows a nonlinearity due to optical saturation of impurities. For samples with doping $\geq 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, we have encountered an additional non-linearity and we show that it is due to an effect of sample heating.

1. Introduction

In a recent publication (1) the nonlinear photoluminescence response due to the optical saturation of impurities has been considered. In the course of these experiments we have encountered a second kind of saturation effect, which is well distinguished from optical saturation, since it appeared independent of the impurity concentration, compare Fig. 1. In reference (1) reasons have been given why this second type of nonlinearity is believed to be an effect of sample heating, due to the optical excitation. In this contribution we offer an independent proof for the proposed interpretation.

Figure 1 :

Integrated iodine luminescence intensity (arbitr. units) in AgBr:I as a function of excitation intensity.

2. Experimental

In these experiments we observe the luminescence due to the recombination of excitons bound to iodine impurities in AgBr (2). The iodine concentration is $2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. The samples were about 0.7 mm thick platelets of 40 mm^2 surface area cut from a crystal. The surface was smooth due to etching with 2N-Na₂S₂O₃ solution. The samples were mounted with GE-varnish on two thin Cu wires and immersed into liquid helium pumped below the λ -point (temperature about 2.0 K), such that the liquid had access to the front and back side of the platelets. For the excitation, the UV beam (2 W/cm^2) of an Ar-ion laser was mechanically chopped such that excitation times as well as intervals could be varied independently within certain limits.

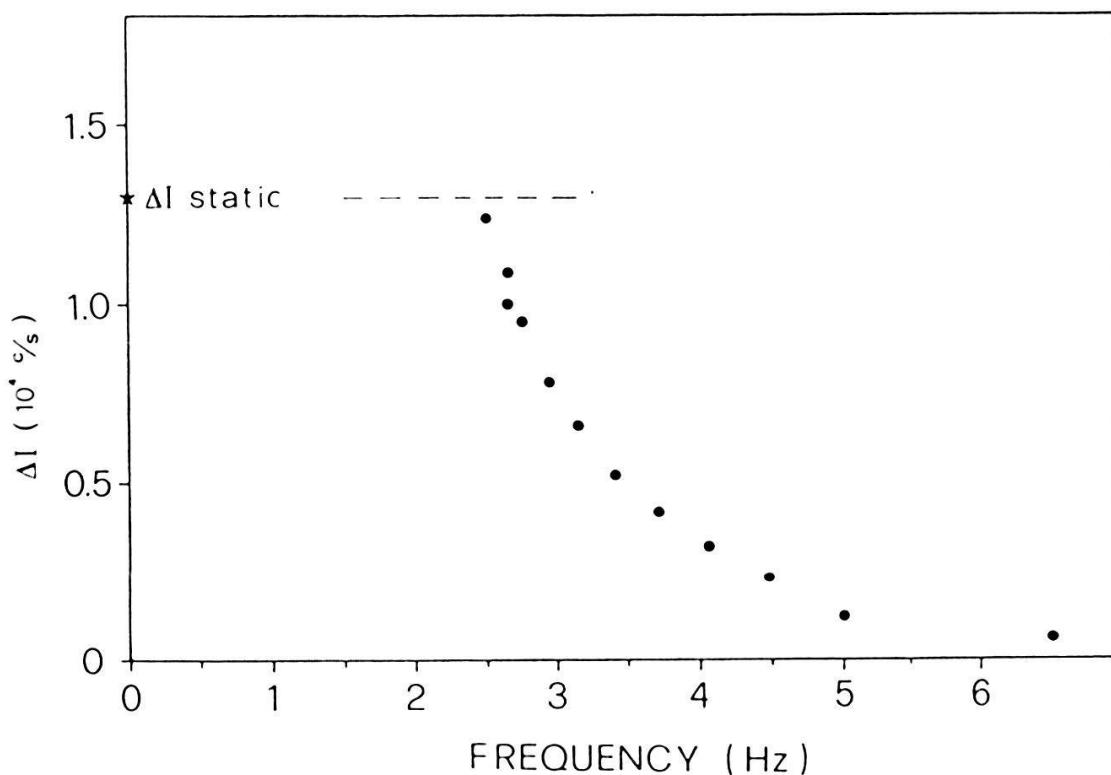


Figure 2 : variation of luminescence intensity as a function of excitation frequency.

3. Results

In Fig. 2 same results are shown. Knowing the duty cycle of the pulsed excitation, the intensities are corrected as to correspond to continuous excitation. At sufficiently low frequencies we reach the static value, i.e. for this particular pulsed excitation the photoluminescence response in Fig. 1 is strictly linear. This result is taken as experimental verification that this particular nonlinearity is due to sample heating during optical excitation.

These experiments merit some further discussion. Each point of Fig. 2 correspond to a particular steady state of the sample, in which the average sample temperature is believed to be determined by the cooling intervall between excitation pulses. If this intervall is increased, the luminescence intensity remains the same. Furthermore, the results of Fig. 2 are very sensitive to sample geometry and mounting. Under favourable conditions we can extract from dependences similar to that shown in Fig. 2 a time constant τ characteristic for the heat transfer from the sample to the surrounding helium bath. It turns out that this time constant is dependent on excitation, demonstrating that the heat transfer is a rather complex phenomenon. This is backed by similar but more detailed experiments known from literature (3), (4).

Furthermore, we have to realise that using lower excitation densities we reach a point where the heat transfer is only governed by the Kapitza resistance (5), (6).

4. Conclusions

These experiments have shown that the observed luminescence nonlinearity, for samples with doping $\geq 2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, is due to a sample heating. It is important to remark that this heating effect takes place at still low excitation densities (2 W/cm^2). Taking into account the absorption depth of the excitation radiation used, we arrive at a power density of 800 W/cm^3 . Furthermore, the heating will be reduced or even disappears completely if the chopping frequency and the duty cycle are choosen appropriately.

5. References

- (1) W. Czaja and R. Bertato, Helv. Phys. Acta 58, (1985) in press.
- (2) W. Czaja and A. Baldereschi, J. Phys. C 12, 405 (1979).

- (3) W.G. Steward, Int. J. Heat Mass Transfer 21, 863 (1978).
- (4) W. Metzger, R.P. Huebener and K.P. Selig, Cryogenics 22, 387 (1981).
- (5) L.J. Challis, J. Phys. C 7, 481 (1974).
- (6) G. Dharmadurai, Physica 115B, 229 (1982).

Measurement of the temperature dependence of the resistive size effect in pure cadmium: the effect of surface reflectivity

J. van der Maas and R. Huguenin

Institut de Physique Expérimentale de l'Université de Lausanne
1015-Lausanne Switzerland

High resolution ($\sim 3\text{ppm}$) resistivity measurements over the temperature interval 1-9K, have been performed on a cadmium single crystal, which was gradually reduced in size (from 2 mm to $40\mu\text{m}$) by chemical polishing. It is found that etching the surface reduces the temperature dependence in general. There is qualitative agreement with the recent model of Sambles et al (1982).

- J.R. Sambles and T.W. Preist
J. Phys F. Met Phys 12 (1982) 1971-87

Résistivité et pouvoir thermoélectrique du CeCu₆ monocristallin

A. Amato, D. Jaccard, E. Walker et J. Flouquet
Collaboration DPMC Genève - CRTBT Grenoble.

Un monocristal de CeCu₆ (structure orthorombique) a été obtenu par la méthode de Czochralski. Les mesures de résistivité suivant les trois directions cristallines montrent le comportement typique des réseaux de Kondo. La résistivité résiduelle est de l'ordre de 10 $\mu\Omega\text{cm}$. Les propriétés de transport sont comparées à celles d'autres systèmes à Fermions lourds (CeAl₃, CeCu₂Si₂, ...).

Pouvoir thermoélectrique sous haute pression de Yb₂Cu₇

H. Sthioul, D. Jaccard et J. Sierro
Section de Physique, DPMC, CH-1211 Genève 4

Le pouvoir thermoélectrique de Yb₂Cu₇ à pression normale est typique d'un composé de valence intermédiaire avec un pic négatif à 100 K. Sous pression, une seconde anomalie apparaît à plus basse température tandis que le pic principal diminue d'amplitude. Ce comportement est similaire à celui observé dans les composés de cérium et montre la transition entre les régimes de valence intermédiaire et du réseau Kondo.

Propriété de transport de UBe₁₃

D. Jaccard, G. Remenyi et J. Flouquet
Collaboration DPMC Genève - CRTBT Grenoble

Le diagramme du champ critique H_{C2}(T) de UBe₁₃ montre un changement de régime à H ≈ 15 kOe. Ce champ correspond pour T > T_C à la courbure de la magnéto-résistance et à l'inversion de signe de la dérivée en température du pouvoir thermoélectrique. À H = H_{C2}(0) ≈ 102 kOe, la résistivité de la phase normale varie comme $\rho = \alpha + \beta T^2$ pour T < 0.8K avec $\alpha \approx 39 \mu\Omega\text{cm}$ et $\beta \approx 56 \mu\Omega\text{cm/K}^2$. En fonction du champ magnétique α et β décroissent respectivement en H^{0.5} et en H. La conductibilité thermique de la phase supraconductrice varie en T².

Kernresonanzuntersuchung der Ag-Diffusionsprozesse im Superionenleiter Ag_3SBr unter hohem Druck

H. Huber, M. Mali, J. Roos und D. Brinkmann

Physik-Institut, Univ. Zürich, Schönberggasse 9, 8001 Zürich

Wir haben den Einfluss hydrostatischen Druckes auf die Spin-Gitter-Relaxationszeit der mobilen Ag Kerne untersucht. Die Temperaturabhängigkeit der Relaxationsdaten kann durch die Annahme zweier Diffusionsprozesse interpretiert werden; die relevanten Parameter wurden bestimmt. Hydrostatische Drucke bis zu 7 kbar beeinflussen in starkem Maße nicht nur die absoluten Werte, sondern auch die Temperaturabhängigkeit der Relaxationszeiten. Daraus wird die Druckabhängigkeit der Diffusionsparameter gewonnen.

Inelastische Neutronenstreuung an TiS_2

M. Schärli und W. Bührer, Labor für Neutronenstreuung, 5303 Würenlingen

F. Lévy, Institut de Physique Appliquée, EPF, 1015 Lausanne

Die Schichtverbindung TiS_2 , welche heute allgemein als entarteter n-Typ Halbleiter betrachtet wird, zeigt eine metallische Leitfähigkeit ($\rho(T) = \rho_0 + aT^p$, $1.6 \leq p \leq 2.3$) deren Ursprung noch nicht geklärt ist. Verschiedene Streumechanismen wurden vorgeschlagen, u.a. auch ein 2. Ordnungs-Elektron-Phonon-Prozess, welcher die Existenz eines sehr weichen longitudinal akustischen Interlayer-Zweigs erfordert /1/. Unsere Untersuchungen mit kohärenter inelastischer Neutronenstreuung zeigen, dass kein solcher soft-mode existiert. Der postulierte Streuprozess fällt deshalb als mögliche Erklärung der metallischen Leitfähigkeit von TiS_2 dahin.

/1/ M. Kaveh et al., J.Phys. C:Solid State Phys., 14, 1981, L789.

Ueber die Wasserstoff-Bewegung im Hydroxy-Sodaliten $\text{Na}_8(\text{AlSiO}_4)_6(\text{OH})_2$

W. Bührer, Labor für Neutronenstreuung ETHZ, 5303 Würenlingen

S. Luger und J. Felsche, Fakultät für Chemie, Universität Konstanz

Der wasserfreie Hydroxy-Sodalit $\text{Na}_8(\text{AlSiO}_4)_6(\text{OH})_2$ kristallisiert in einer kubischen Struktur (Raumgruppe P43n) und, bei 10 K, einer statistischen Verteilung der Wasserstoffatome auf die 8e Tetraederplätze. Inkohärente quasielastische und unelastische Neutronenstreu-Experimente erlauben Aussagen über das dynamische Verhalten der H-Atome. Messresultate aus dem Temperaturbereich $10\text{K} \leq T \leq 365\text{K}$ werden mit einem einfachen Sprungmodell analysiert und Schwingungsfrequenzen, Residenzzeiten und Sprungvektoren der H-Atome diskutiert.

KOND II : Magnetismus

ELASTISCHE EIGENSCHAFTEN VON URANMONOCHALKOGENIDEN

J. Neuenschwander, O. Vogt, E. Voit, P. Wachter, Laboratorium für Festkörperphysik ETH Zürich, CH-8093 ZÜRICH, Switzerland

Die Verbindungen UX ($X = S, Se, Te$) kristallisieren in der NaCl Struktur. Sie sind ferromagnetische Metalle mit Ordnungstemperaturen von $T_C = 180$ K, 160 K und 104 K [1]. Die magnetischen Momente der Uranionen zeigen in [111] Richtungen. Die Anisotropiefelder werden auf $\approx 10^6$ G geschätzt [1]. Unterhalb T_C setzt eine rhomboedrische Verzerrung ein. Der interaxiale Winkel nimmt von 90° ausgehend um $0.26\text{--}0.4^\circ$ bis 0 K ab [2,3].

Anomalien in den Phonondispersionsrelationen gaben zu der Spekulation Anlass, gewisse Uran-Verbindungen als zwischenvivalent zu bezeichnen [4,5]. Viele zwischenvalente Verbindungen Seltener Erden zeigen einen kleinen Kompressionsmodul B und eine negative Poissonzahl ν (z.B. $TmSe$, $Sm_{0.75}Y_{0.25}S$), d.h. solche Verbindungen sind relativ weich und ziehen sich bei uniaxalem Druck in allen Richtungen zusammen.

Wir haben bei Zimmertemperatur die Druckabhängigkeit des Volumens der UX untersucht. Die Kompressionsmoduln B ergeben sich zu 109 GPa, 67 GPa, 42 GPa für US , USe und UTE . Doppeltlogarithmisch gegen das Volumen der Elementarzelle aufgetragen, liegen diese Werte auf einer Geraden, welche deutlich steiler verläuft, als die entsprechenden Geraden integral-valenter Verbindungen Seltener Erden [6]. Aus Ultraschallmessungen in [100] und [110] Richtung lassen sich bei kubischen Kristallen alle Elastizitätsmoduln ermitteln. Wir erhalten für USe $\nu = +0.04$ und für UTE $\nu = -0.17$. Im Falle von USe sind wir vorläufig noch auf eine Abschätzung angewiesen. Aus einer Kombination von C_{11} und B erhalten wir für USe $\nu = -0.08$. Die schon beim Kompressionsmodul bemerkte Zunahme der Anomalie in der Folge US , USe , UTE kommt in der Poissonzahl ν noch deutlicher zum Ausdruck. $\nu < 0$ bei USe und UTE deutet auf die Existenz eines "breathing"-Modes der Uran-Ionen. $\nu < 0$ wurde bislang nur bei zwischenvalenten Verbindungen Seltener Erden gefunden. Die Temperaturabhängigkeit der Elastizitätsmoduln C_{ij} sollte Aufschluss geben über den Einfluss der ferromagnetischen Ordnung auf die Poissonzahl. An USe konnten wir $C_{11}(T)$ und $C_{44}(T)$ bestimmen (Fig. 1). Das für die Poissonzahl benötigte $C_{12}(T)$ liess sich noch nicht messen. Unsere Kurven verlaufen ähnlich wie die entsprechenden von US [7]. C_{11} nimmt zu mit sinkender Temperatur und zeigt bei T_C eine

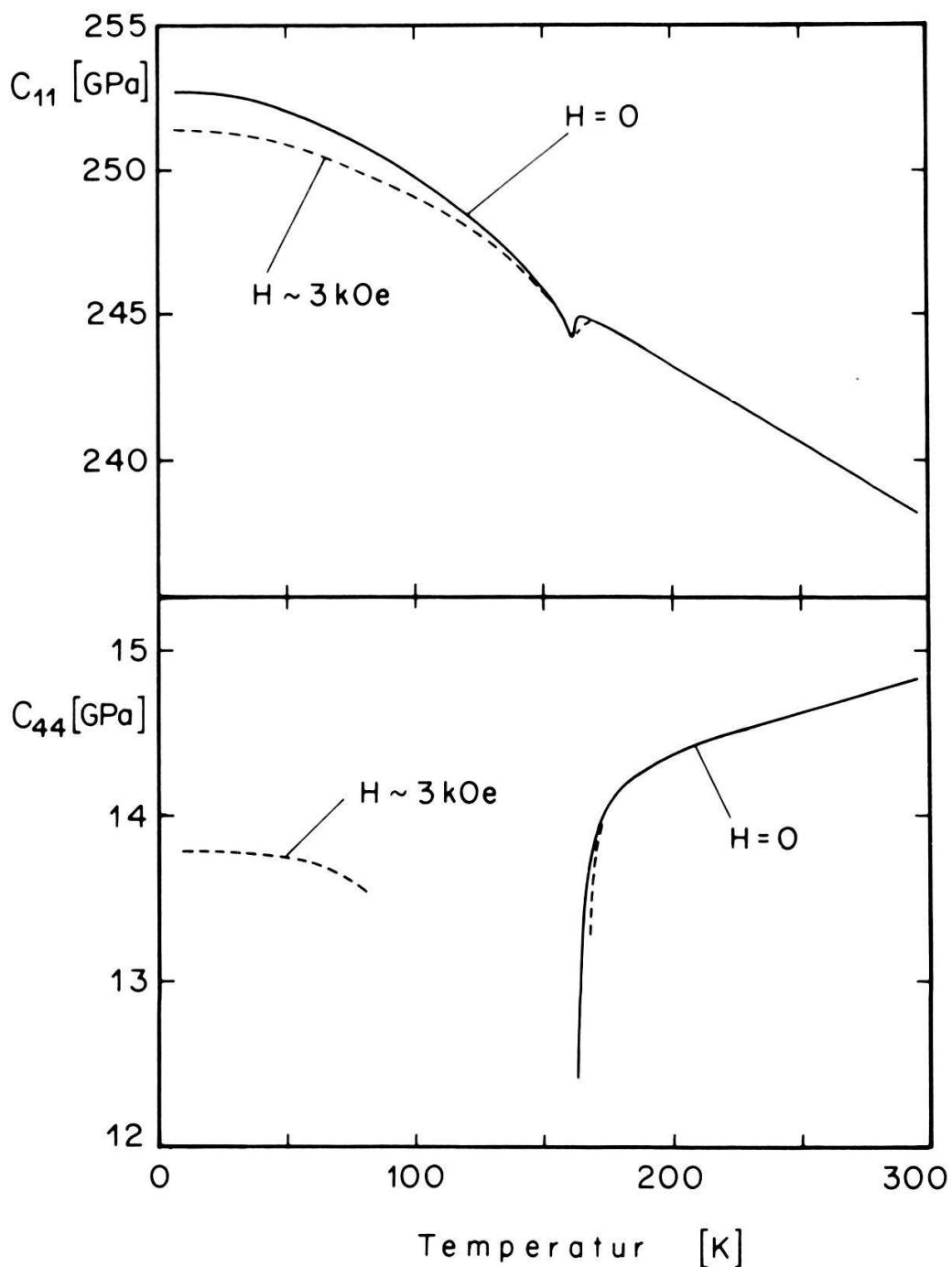


Fig. 1: Temperaturabhängigkeit der Elastizitätsmodulen C_{11} (oben) und C_{44} (unten) von USe. Temperaturabhängigkeiten der Dichte und Länge wurden nicht berücksichtigt.

kleine Struktur, welche aber deutlich kleiner ist als bei US. Ein Magnetfeld von ≈ 3 kG verbreitert die Struktur bei T_C etwas und erniedrigt C_{11} bei tiefen Temperaturen, was auf einer Umverteilung der Domänen beruhen kann. C_{44} nimmt von Zimmertemperatur ausgehend mit sinkender Temperatur ab, erst linear, dann nahe T_C sehr drastisch. Unterhalb ≈ 163 K konnten bei Nullfeld wegen starker Dämpfung keine Echos mehr detektiert werden. Erst die Messung in einem Magnetfeld erlaubte unterhalb ≈ 80 K die Bestimmung von C_{44} .

Die Anomalien im Temperaturverhalten der Elastizitätsmoduln sind der Ausdruck einer starken Spin-Phonon Wechselwirkung. Die äusserst starke Dämpfung des C_{44} Modes für $T < T_C$ ist wahrscheinlich auf die Wechselwirkung der Scherwelle mit der rhomboedrischen Gitterverzerrung zurückzuführen. Ein Magnetfeld vergrössert die Domänen, was mit einer Abschwächung des Verlustmechanismus verknüpft ist. Longitudinale Wellen in der [100] Richtung sind weniger empfindlich auf diese Verzerrung, weshalb keine anomal hohe Dämpfung unterhalb T_C beobachtet wird.

Referenzen

- [1] O. Vogt, *Physica* 102B (1980) 206.
- [2] J.A.C. Maples, *J. Phys. Chem. Solids* 31 (1970) 2431.
- [3] F. Hulliger und O. Vogt, *Physica* 102B (1980) 316.
- [4] T.M. Holden, W.J.L. Buyers, E.C. Svensson, J.A. Jackman, A.F. Murray, O. Vogt, P. de V. Du Plessis, *J. Appl. Phys.* 53 (1982) 1967.
- [5] W.J.L. Buyers, T.M. Holden, J.A. Jackman, A.F. Murray, P. de V. Du Plessis, *J. Magn. Magn. Mat.* 31-34 (1983) 229.
- [6] A. Jayaraman, B. Batlogg, R.G. Maines, H. Bach, *Phys. Rev.* B26 (1982) 3347.
- [7] P. de V. Du Plessis, D.L. Tillwick, *J. Appl. Phys.* 50 (1979) 1834.

TRANSPORTEIGENSCHAFTEN VON CeS EINKRISTALLEN

J. Schoenes und F. Hulliger, Laboratorium für Festkörperphysik ETH Zürich,
CH-8093 ZÜRICH, Switzerland

Inhalt: Der elektrische Widerstand $\rho(T)$ und der Hall-Effekt wurden an CeS Einkristallen für Temperaturen zwischen 3 und 300 K gemessen. Neben einem Maximum von $\rho(T)$ bei $T_N = 8.4$ K, tritt ein zweites Maximum bei ≈ 75 K auf, das auf die Streuung der Leitungselektronen am angeregten Γ_8 Kristallfeldniveau des $4f^1(F_{5/2})$ -Zustands zurückgeführt wird. Die auftretenden negativen Temperaturkoeffizienten weisen auf das Vorhandensein des Kondo-Effekts hin.

1. Einleitung

CeS kristallisiert in der NaCl-Struktur und ordnet antiferromagnetisch bei $T_N = 8.4$ K [1]. Optische Messungen [2] zeigen einen $4f$ Zustand der ca. 2.5 eV unterhalb E_F liegt und ein d-Leitungsband, das mit ≈ 1 Elektron pro Formel-Einheit gefüllt ist. Ein ähnlich normales Verhalten zeigen spezifische Wärme- und lineare Ausdehnungsuntersuchungen [1]. Lediglich die Suszeptibilitätsmessungen der gleichen Autoren deuten, durch die beobachtete Verringerung der Curie-Konstanten gegenüber dem freien Ionen Wert des $4f^1(^2F_{5/2})$ Zustands, auf eine mögliche Anomalie hin. Die Temperaturabhängigkeit der Suszeptibilität lässt sich ansonsten aber fitten unter der Annahme eines Γ_7 -Grundzustandes und eines angeregten Γ_8 -Quartetts, das ca. 130 K über dem Γ_7 Doublett liegt [1]. Elektrische Transportmessungen zeigen nun, dass CeS durchaus kein normales, antiferromagnetisch ordnendes Metall ist, sondern Charakteristiken der konzentrierten Kondo-Systeme besitzt.

2. Experimentelles

Der elektrische Widerstand und der Hall-Effekt wurden an zwei einkristallinen Proben (Probennummer 78) mit Gitterkonstanten 5.7789 Å mit Hilfe der van der Pauw-Methode bestimmt [3]. Die Temperatur wurde zwischen 3 und 300 K variiert und das Feld betrug 0, 30 oder 40 kOe. Zusätzlich wurden für einige Temperaturen Hall-Effekt-Messungen als Funktion des Feldes, für Felder bis zu 100 kOe durchgeführt.

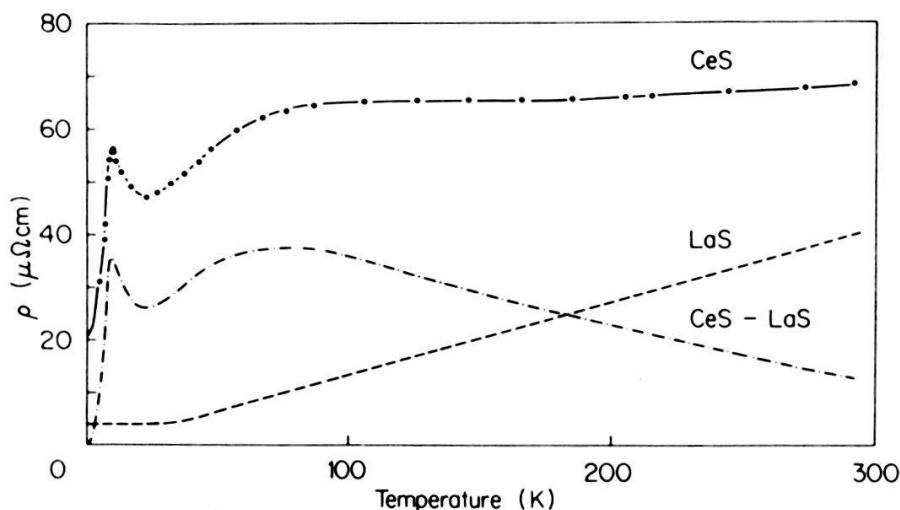


Abb. 1. Der elektrische Widerstand von CeS; wie gemessen (—) und nach Abzug des Restwiderstands und eines Elektron-Phonon-Beitrags (-·-·-), der von LaS [4] (----) übernommen wurde.

3. Ergebnisse und Diskussion

Die Temperaturabhängigkeit des elektrischen Widerstandes $\rho(T)$ von CeS ist in Abb. 1 für $H = 0$ dargestellt. Wir beobachten zunächst einen starken Anstieg von $\rho(T)$ bei tiefen Temperaturen, der als $\rho(T) = \rho_0 + c_m T^2$ beschrieben werden kann. Innerhalb unserer Temperaturnessgenauigkeit von 1 K tritt ein scharfes Maximum bei $T_N = 8.4$ K auf, dem ein Abfall des Widerstands mit zunehmender Temperatur folgt. Bei ca. 23 K finden wir erneut ein Vorzeichenwechsel von $d\rho/dT$. Eine Sättigungstendenz von ρ wird zwischen 100 und 200 K beobachtet, während oberhalb 200 K ρ mit T wieder stärker zunimmt. Die Ursache dieses komplexen Temperaturverhaltens des elektrischen Widerstands wird klarer, wenn wir den Phononenbeitrag $\rho_{El.Ph.}$ zum Widerstand abziehen. Hierzu bieten sich prinzipiell Messungen an LaS an [4,5], doch weisen diese leider erhebliche Unterschiede von Probe zu Probe auf. Wir haben diejenige Kurve aus [4] mit dem kleinsten Temperaturkoeffizienten gewählt, da sie ähnlich derjenigen in [5] ist und ansonsten der Widerstandsrest für CeS einen unphysikalischen negativen Wert ergeben würde. Abb. 1 gibt den Widerstandsverlauf für diese LaS Probe wieder und zeigt gleichzeitig die Differenz $\rho(CeS) - \rho_0(CeS) - \rho_{El.Ph.}$ (LaS). Wir erkennen nun, neben dem Maximum bei T_N , ein zweites, breiteres Maximum bei ca. 75 K, und damit verbunden, ein zweites Temperaturintervall mit $d\rho/dT < 0$. Dieses Verhalten ist ganz analog zu demjenigen des $CeAl_2$, das als klassischer Fall eines Kondo-Systems mit Kristallfeldaufspaltung gilt [6]. Entsprechend interpretieren wir unsere Ergebnisse

am CeS. Für $T < T_N$ wird der Widerstand durch Elektron-Magnon-Streuung bestimmt. Oberhalb T_N befinden wir uns im Kondo-Gebiet, wobei die Leitungselektronen zunächst überwiegend am Γ_7 -Dublett gestreut werden. Mit zunehmender Temperatur tritt mehr und mehr Streuung am angeregten Γ_8 Quartett hinzu und der Widerstand steigt an bis $T_{M2} \approx \Delta E(\Gamma_8 - \Gamma_7)$. Weit oberhalb dieser Temperatur T_{M2} kommt sodann das typische Kondo-Verhalten wieder zum Vorschein mit $d\rho/dT < 0$. Eine Darstellung des Widerstands gegen $\ln T$ zeigt in der Tat zwei nahezu lineare Bereiche. Das Verhältnis der Steigungen entspricht jedoch nicht dem Verhältnis der Entartungen der Streuniveaus, wie es theoretisch vorausgesagt wird [6].

Der Hall-Widerstand ist im ganzen Temperaturbereich negativ, zeigt aber ein ähnlich komplexes Verhalten wie der Widerstand. Oberhalb 150 K, lässt sich der totale Hall-Widerstand zerlegen in einen ordentlichen (R_0) und einen ausserordentlichen (R_S) Anteil entsprechend dem Ausdruck $\rho_H = R_0 \cdot H + R_S \cdot H \cdot 4\pi C/(T-\theta)$. Aus dem ordentlichen Anteil R_0 ergibt sich im Einbandmodell eine Konzentration von 1.4 Elektronen pro Formeleinheit, was eher gross scheint. Der ausserordentliche Hall-Widerstand R_S ist positiv. Bei negativ geladenen Ladungsträgern bedeutet dies eine negative Spin Polarisation, wie es für ein Kondosystem erwartet wird. Die Temperaturabhängigkeit des Hall-Effekts verläuft qualitativ wie $\rho^2(T)$.

4. Schluss

Transportmessungen an CeS zeigen, dass diese Substanz wie fast alle Cer-Verbindungen kein einfaches magnetisches System ist. Das Auftreten eines Kondo-Verhaltens erklärt die beobachtete Verringerung des paramagnetischen Moments gegenüber dem Wert freier Ionen. Zusammen mit den spektroskopischen Daten legen die Transportmessungen für CeS das Modell einer Kondo-Resonanz bei E_F nahe.

5. Referenzen

- [1] F. Hulliger, B. Natterer and H.R. Ott, J. Magn. Magn. Mat. 8, 87 (1978).
- [2] J. Schoenes in: Moment Formation in Solids, W.J.L. Buyers Ed. New-York, Plenum (1984) p. 237.
- [3] J. Schoenes, B. Frick and O. Vogt, Phys. Rev. B30, 6578 (1984).
- [4] R. Hauger, E. Kaldis, G. von Schulthess, P. Wachter and Ch. Zürcher J. Magn. Magn. Mat. 3, 103 (1976).
- [5] G. Chouteau, O. Pena, F. Holtzberg, T. Penney, R. Tournier and S. von Molnar, J. Physique Colloque 37, C4-283 (1976).
- [6] B. Cornut and B. Coqblin, Phys. Rev. B5, 4541 (1972).

Magnetische Phasendiagramme von HoAs

B. Schmid, P. Fischer und A. Furrer, Labor für Neutronenstreuung ETHZ,
5303 Würenlingen, und F. Hulliger, Labor für Festkörperphysik ETHZ,
8093 Zürich

Das magnetische Verhalten von HoAs in externen Feldern entlang der (001) (011) Richtungen wurde mittels elastischer Neutronenstreuung untersucht. Ohne Feld unterliegt HoAs einem Phasenübergang zweiter Ordnung und ordnet antiferromagnetisch bei $T_N=4.65(5)$ K. Mit zunehmendem Magnetfeld tritt ein 1. Ordnungsübergang von der antiferromagnetischen in eine flop-side Phase auf, bei der das fcc-Gitter der Holmium-ionen sich in zwei Untergitter aufteilt, die aus ferromagnetischen (111) Ebenen bestehen. Die Untergittermagnetisierungen \hat{M}_A und \hat{M}_B sind entlang der Würfelkanten orientiert und stehen senkrecht aufeinander. Mittels in-elastischer Streuung wurde die Kristallfeldaufspaltung gemessen, deren Analyse eine theoretische Berechnung des magnetischen Verhaltens erlaubt.

The Hyperfine Anomaly at a Negative Muon in Ferromagnetic Nickel and Iron

Hp. Baumeler, H. Keller, R.F. Kiefl, W. Kündig and B.D. Patterson, University of Zurich; J. Imazato, K. Nagamine, K. Nishiyama and T. Yamazaki, University of Tokyo; R.I. Grynspan, CNRS, Vitry (France)

A negative muon stopped in a solid forms a muonic atom μ^-Z . Although this μ^-Z pseudonucleus appears to the atomic electrons very similar to an isolated Z-1 impurity nucleus, the hyperfine field at the μ^- in a ferromagnet, however, differs from that seen by a Z-1 nucleus since the muon wave function extends outside the nucleus. The relative difference in the hyperfine fields is the hyperfine anomaly and may be measured by means of a combined negative muon spin rotation and NMR experiment. Measurements of the hyperfine field for μ^-Ni and μ^-Fe are presented and compared respectively with $^{59}CoNi$ and $^{55}MnFe$ NMR data. Such experiments give information not otherwise available about the radial dependence of the electron spin density near the nucleus.

Untersuchung von NiMnSb mit Spinpolarisierter Photoemission

G.L. Bona, F. Meier, M. Taborelli, E. Bucher* und P.H. Schmidt**
Laboratorium für Festkörperphysik ETH-Hönggerberg, 8093 Zürich
* Fakultät für Physik, Universität Konstanz, D-7750 Konstanz
**AT&T Bell Laboratories, Murray Hill, New Jersey 07974

Bandstrukturrechnungen sagen voraus, dass NiMnSb ein halbmetallischer Ferromagnet ist. Dies bedeutet, dass die Majoritäts-elektronen metallische Eigenschaften, die Minoritätselektronen hingegen halbleitenden Charakter haben. Wegen der Energiefülle zwischen besetzten und leeren Minoritätsniveaus müssen nahe der Photoschwelle emittierte Elektronen vollständig polarisiert sein. Spinpolarisierte Photoemissionsmessungen haben jedoch eine maximale Polarisation von nur 54% ergeben. Die verschiedenen Effekte, welche für eine Verminderung der Polarisation verantwortlich sein können, werden diskutiert.

KOND III : Oberflächen, Grenzflächen

SURFACE STATES AT THE SC/ELECTROLYTE INTERFACE STUDIED BY ELECTROREFLECTANCE

T. Cotting, H. von Känel, Laboratorium für Festkörperphysik ETH Zürich,
CH-8093 ZÜRICH, Switzerland

It is well known that the semiconductor band bending at the semiconductor/metal interface is in many cases almost independent from the metal work function. A similar phenomenon was observed at the semiconductor/electrolyte interface where the band bending did not vary as much as the electrochemical potential of different redox couples in the electrolyte [1]. Such a behaviour can be explained with the pinning of the Fermi level by a large number of surface states in the bandgap region [2]. (For a recent review see also [3]). If a partial pinning of the Fermi level occurs at the semiconductor/electrolyte interface a change of the electrode potential results in a potential drop ΔV_H across the Helmholtz double layer in addition to ΔV_{SC} across the semiconductor space charge layer. In such a situation the obtainable photovoltage of a solar cell device may be greatly reduced.

Electroreflectance has been shown to be a convenient method to detect a possible Fermi level pinning [4,5]. The most straightforward way to apply this technique is based on the low field approximation [6]. In this case the electroreflectance signal is given by

$$\frac{\Delta R}{R} = - \left(\frac{2eN_A}{\epsilon} \right) \Delta V_{SC} L(h\omega) \quad (1)$$

where ΔV_{SC} is the fundamental harmonic component measured by phase-sensitive detection from a time-dependent potential $V(t)$ across the space charge layer and $L(h\omega)$ is a line shape function which is independent from bias potential.

Experimentally the conditions for the low field limit require a) linear dependence of $\Delta R/R$ on the modulation amplitude and b) independence at $L(h\omega)$ from the electrode potential [6].

For sufficiently fast surface states a potential modulation divides in a modulation across the semiconductor and one across the Helmholtz double layer, according to eq. (2).

$$\Delta V = \Delta V_{SC} + \Delta V_H \quad (2)$$

In the presence of a large density of fast surface states in the region of the semiconductor Fermi level, part of the potential modulation drops across the Helmholtz layer, reducing the one across the space charge region.

We have investigated the $\beta\text{-ZnP}_2$ /aqueous electrolyte interface for a number of doping concentrations between $2.5 \cdot 10^{15}/\text{cm}^3$ and $2 \cdot 10^{17}/\text{cm}^3$. $\beta\text{-ZnP}_2$ is a p-type semiconductor with a band gap of ≈ 1.5 eV [7,8,9]. The electrodes were briefly etched in diluted aqua regia prior to the measurements.

For all doping concentrations the linearity in the modulation amplitude was observed up to at least 500 mV_{pp}. In fig. 1 we demonstrate the independence of $\Delta R/R$ from the electrode potential for a doping concentration of $2.5 \cdot 10^{15}/\text{cm}^3$. The excellent agreement of the four curves together with the linearity is an unambiguous proof that we are within the low field regime.

Having established the observance of the low field regime we are now in a position to extract useful information from the variation of $\Delta R/R$ as a function of the electrode potential.

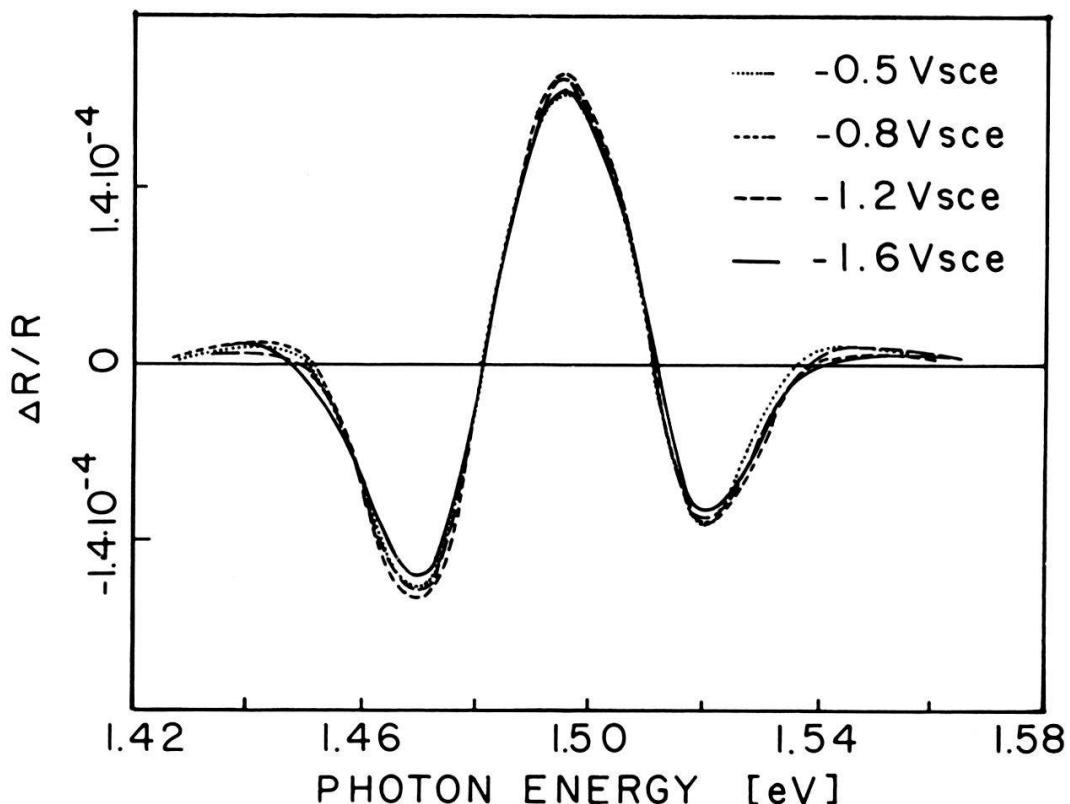


Fig. 1. Electrolyte-Electroreflectance (EER) spectra of $\beta\text{-ZnP}_2$ in 1N H_2SO_4 for various values of electrode potentials. $N_A \approx 2.5 \cdot 10^{15}/\text{cm}^3$, modulation 200 mV_{pp}, $v = 125$ Hz, $E \parallel c$.

According to eqs. (1) and (2) a change in the surface state density (for surface states with relaxation frequencies above the frequency of the applied modulation) should be reflected in a change of the EER-signal. To get information about slow surface states we measured the EER-signal down to a modulation frequency of 12 Hz. This limit was given by the signal to noise ratio.

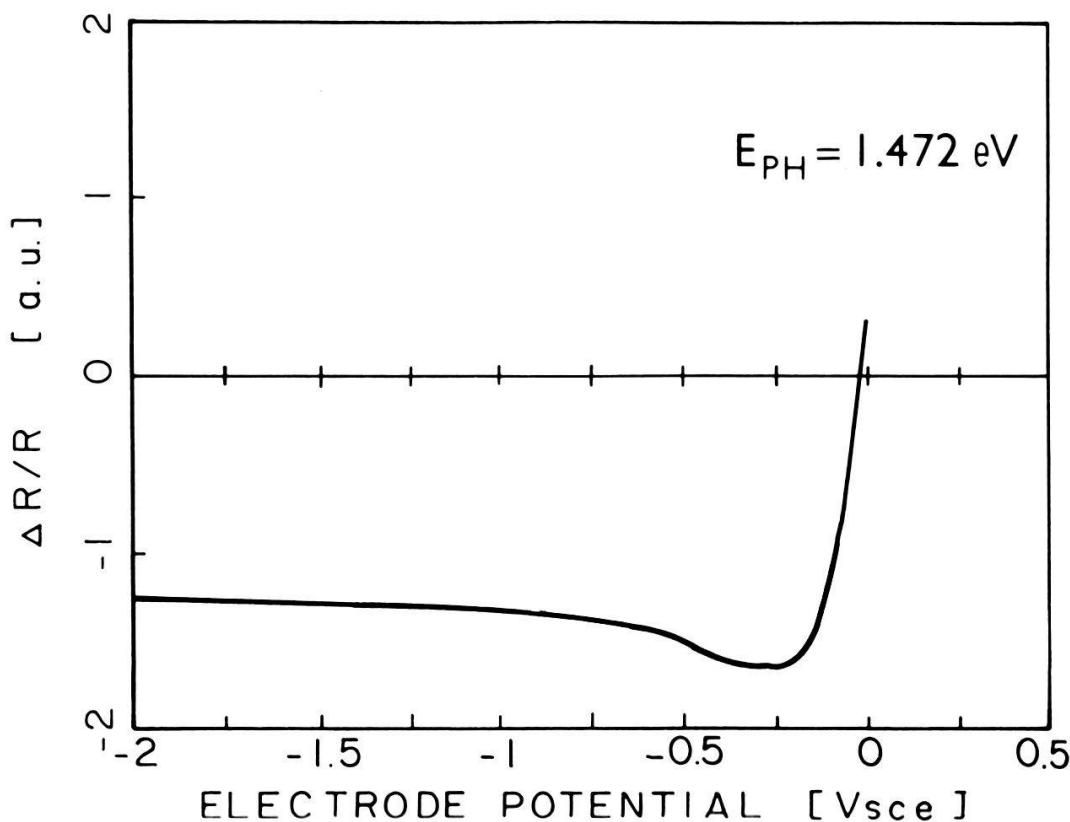


Fig. 2. EER signal amplitude of $\beta\text{-ZnP}_2$ in 1N H_2SO_4 versus electrode potential, $N_A \approx 2.5 \cdot 10^{15}/\text{cm}^3$, modulation 200 mV_{pp}, $v = 12$ Hz, $E \parallel c$.

Fig. 2 shows the electroreflectance signal vs. electrode potential. The zero crossing of $\Delta R/R$ coincides with the flatband potential derived from capacity measurements [8]. The nearly constant signal towards negative potentials indicates that Fermi level pinning by surface states faster than 12 Hz can be ruled out at the $\beta\text{-ZnP}_2$ /aqueous electrolyte interface.

Acknowledgement

We would like to express our special gratitude to Mr. L. Gantert for technical assistance and for preparing the electrodes, as well as to Mr. R. Hauger for growing the β -ZnP₂ crystals. Financial support by the Swiss Energy Research Fund (NEFF) is gratefully acknowledged.

References

- [1] A.J. Bard, A.B. Bocarsly, F.R.F. Fan, E.G. Walton and M.S. Wrighton, J. Am. Chem. Soc., 102, 3671 (1980).
- [2] J. Bardeen, Phys. Rev., 71, 717 (1947).
- [3] L.J. Brillson, J. Phys. Chem. Solids 44, 703 (1983).
- [4] M. Tomkiewicz, W. Siripala, R. Tenne, J. Electrochem. Soc., 131, 733 (1984).
- [5] R.P. Silberstein, F.H. Pollak, J.K. Lyden, M. Tomkiewicz, Phys. Rev. B24 7397 (1981).
- [6] D.E. Aspnes, Handbook on Semiconductors, ed. M. Balkanski, 2, 109 (1980) and references therein.
- [7] D.H.M.W. Thewissen, A.H.A. Tinnemanns, E.A. van der Zouwen-Assink, A. Mackor, H. von Känel, R. Hauger and P. Wachter, J. Electrochem. Soc. 131, 2048 (1984).
- [8] H. von Känel, L. Gantert, R. Hauger and P. Wachter, Proc. 5th World Hydrogen Energy Conf. Toronto 3, 969 (1984).
- [9] H. von Känel, R. Hauger and P. Wachter, Solid State Commun. 43, 619 (1982).

ETUDE ET CARACTERISATION DE CATALYSEURS DE PLATINE PAR RMN.

J.P. Bucher, J.J. van der Klink, J. Buttet et M. Graetzel.

Ecole polytechnique fédérale de Lausanne, 1015 Lausanne.

E. Newson, T.B. Truong.

Schweizerische Aluminium A.G. Forschung u. Entwicklung, 8212 Neuhausen.

Nous avons étudié des catalyseurs industriels (Pt sur support minéral) qui diffèrent entre eux essentiellement par la taille de leurs particules de Pt (10 Å à 30 Å). La technique RMN permet une caractérisation assez fine, basée sur le fait que les noyaux se trouvant à la surface des particules subissent un knight-shift différent de ceux se trouvant dans le volume. Ces mesures ont été complétées par des mesures comparatives de microscopie électronique et de titration H₂. Les catalyseurs ont été testés au moyen de deux réactions chimiques type, dont l'une est sensible à la taille des particules.

Der Oberflächen-Phasenübergang am System $\text{Fe}_{1-x}\text{Cr}_x/\text{Elektrolyt}$:
Sein Mechanismus und seine Bedeutung für die Korrosion von Stählen.

P.Brüesch, K.Müller, A.Atrens*, H.Neff**, K.Bennemann*** Brown Boveri Forschungszentrum, CH-5405 Baden; *University of Queensland, Australia; **North Carolina State University, USA; ***Freie Universität Berlin, BRD.

Es ist bekannt, dass $\text{Fe}_{1-x}\text{Cr}_x$ -Stähle in wässrigen Elektrolyten korrodieren, wenn $x < x_{\text{crit}} = 0.12$, dagegen korrosionsresistent sind, falls $x > x_{\text{crit}}$. Wir haben einerseits die elektrochemischen Eigenschaften (Korrosionsstrom, Potentiale) und andererseits die Oberflächeneigenschaften einer Reihe von $\text{Fe}_{1-x}\text{Cr}_x$ -Stählen mit $0 \leq x \leq 1$ untersucht und miteinander korreliert (Elektrolyt: 0.1 M NaCl-Lösung). Die XPS-Messungen zeigen eine drastische Änderung in der Zusammensetzung und Dicke der Oberflächenfilme bei $x = x_{\text{crit}}$. Dieser Oberflächen-Phasenübergang wird mit Hilfe einer einfachen Segregations-Theorie für die Grenzfläche Legierung/Elektrolyt interpretiert.

Ir auf Si(100)-Oberflächen: Elektronenstruktur der Grenzschicht und der Ir-Silizide

P. Oelhafen, Institut für Physik der Universität Basel
M. Wittmer und K.N. Tu, IBM Thomas J. Watson Res. Lab., Yorktown Heights, USA

Die mikroskopische Charakterisierung der Metall-Halbleiter Grenzschichten und der dazugehörigen Silizide ist für das Verständnis des elektrischen Transports durch die Grenzschicht von grosser Bedeutung. Dabei spielt die Elektronenspektroskopie (UPS, LEED, XPS und AES) neben elektronenmikroskopischen Methoden eine bedeutende Rolle. Es soll am Beispiel des Systems Ir/Si gezeigt werden, wie mit ARUPS, ARXPS und AES wichtige Informationen über die Elektronenstruktur im Bereich der Metall-Halbleiter Grenzschicht und der Ir-Silizide gewonnen werden können.

Der Einfluss von Ionenbeschuss auf die Pd-Si Grenzfläche

A.J. Brunner, P. Oelhafen, R. Schlögl, H.-J. Güntherodt
Institut für Physik der Universität Basel, Klingelbergstr. 82, CH-4056 Basel

Ein auf eine Si(100) Oberfläche aufgedampfter Pd-Film wird als weiteres Beispiel einer Metall-Halbleiter Grenzfläche untersucht. Dabei wird vor allem der Einfluss des Ionen-Sputterns aufgezeigt. Mit Hilfe von Ar Ionen-Sputtern haben wir ein Tiefenprofil der Grenzfläche aufgenommen und vergleichen die dabei erhaltenen UPS Valenzbandspektren, XPS Rumpflinien und Augenspektren mit Messungen an glasartigen Pd-Si Legierungen und mit früher publizierten Resultaten des Systems Pd-Si(100). (1,2)

- (1) G.W. Rubloff: Surf. Sci. 132, No 1-3, 268-314 (Sept. 1983) und darin enthaltene Referenzen.
- (2) L. Braicovich: Surf. Sci. 132, No 1-3, 315-323 (Sept. 1983).

AES/ISS-Profilanalyse der Korngrenzen in ZnO-Varistoren

E. Gisler*, Institut für angewandte Physik, ETHZ, CH-8093 Zürich

F. Greuter, Brown Boveri Research Center, CH-5405 Baden

*z.Zt.: Institut für Physik, Universität Basel, Klingelbergstr.82, 4056 Basel

Die Segregation von Dotierstoffen an den Korngrenzen in polykristallinem ZnO ist die Ursache für die hoch nichtlinearen elektrischen Eigenschaften von Varistoren. Tiefenprofile an in situ hergestellten intergranularen Bruchflächen wurden mit einem neuartigen Hybrid-AES/ISS Spektrometer untersucht. An den Korngrenzen wird eine deutliche Anreicherung von Bi beobachtet, das bekanntlich für die elektrische Aktivität dieser Grenzflächen entscheidend ist. Die Eichung mit gemessenen absoluten Sputterausbeuten zeigt, dass sich diese Anreicherung nur über eine monoatomare Lage erstreckt. Das vom Temperprozess abhängige Benetzungsverhalten der Bi_2O_3 -reichen Tripelpunktphase beeinflusst die an den Korngrenzen beobachtete Bi-Bedeckung, welche einige Prozente einer Monolage beträgt.

Thermodésorption par chauffage non-linéaire de l'échantillon

E. Bornand

Institut de Physique Appliquée, EPFL, 1015 Lausanne

Habituellement, lors d'une mesure de TDS (thermal desorption spectroscopy), l'échantillon est chauffé de façon linéaire ($T(t)=T_0 + \beta t$, où β est le taux de chauffage). Nous montrons que les spectres de TDS sont interprétables dans le cas d'un chauffage non-linéaire. Nous appliquons ces résultats au chauffage exponentiel $T(t)=T_a - (T_a - T_0) \cdot \exp(-\alpha t)$ ($\alpha > 0$) et illustrons ceux-ci par, d'une part, des simulations numériques de spectres, et, d'autre part, des mesures de thermodésorption effectuées sur des couches minces de SnO_2 déposées sur SiO_2/Si et exposées à différents gaz (CO, ...).

L'adsorption de l'hydrogène sur la surface (111) du palladium

J.-P. Muscat

Institut de Physique Théorique, Université de Lausanne, 1015

On étudie les propriétés électroniques du système H/Pd (111) que l'on compare aux résultats récents de photoémission. Le meilleur accord avec ceux-ci est obtenu quand H est situé entre 3 atomes de métal, 1,02 Å au dessus de la surface.

On calcule aussi l'énergie de liaison de l'atome d'hydrogène à la surface du métal ainsi que les énergies d'interaction entre atomes d'hydrogène pour diverses configurations. Les résultats montrent la possibilité d'une grande mobilité des atomes d'hydrogène à la surface du métal.

KOND IV : Dislokationen, Defekte, Metallurgie

Spectre de frottement intérieur du cobalt

J.E. Bidaux, R. Schaller

Institut de Génie Atomique, EPFL, PHB-Ecublens, 1015 Lausanne

Dans les alliages à mémoire de forme de type TiNi et CuZnAl, des mesures de frottement intérieur ont montré que la dynamique de la transformation martensitique était contrôlée par des mécanismes semblables à ceux qui contrôlent la dynamique des dislocations. Des mesures semblables sont effectuées dans le Cobalt dans le domaine de température de la transformation allotropique. A basse fréquence ($\sim 1\text{Hz}$) un pic important apparaît proportionnel à $\frac{T}{\omega}$ par contre le deuxième terme (attribué aux dislocations) présente un comportement différent. Ces différences pourraient être reliées au domaine de température beaucoup plus élevé où se situe la transformation allotropique du Cobalt.

Etude du fond de frottement intérieur dans des alliages dilués d'Au-Pt

J. Baur - W. Benoit

Institut de Génie Atomique, EPFL, Ecublens, 1015 Lausanne

A moyenne fréquence, le fond de frottement intérieur (F.I.) des métaux CFC est expliqué par des mécanismes de relaxation qui sont dus à des interactions entre dislocations et défauts ponctuels. Des mesures récentes de F.I. lors d'irradiation ont montré que cette interprétation en termes de relaxation n'était pas satisfaisante. Dans le but de préciser ces mécanismes d'interaction nous avons étudié le fond de F.I. dans des alliages très dilués d'Au-Pt. Nos mesures montrent que le fond dû aux dislocations est indépendant de la fréquence de mesure et ne peut être expliqué par des mécanismes de relaxation. De plus il dépend essentiellement de l'amplitude de déformation, de telle manière qu'à amplitude très faible le fond de F.I. n'est dû qu'à l'effet thermoélastique.

Stabilité de la structure de bulles d'He dans l'aluminium.

J-L.Verger-Gaugry, D.Gavillet, J-L.Martin
 Institut de Génie Atomique, DP, EPFL, 1015 Lausanne
 M.Victoria
 Fusion Technology, EIR, 5303 Würenlingen

Des feuilles d'aluminium 6N ont été irradiées dans le faisceau de protons du SIN. Les particules de 600 MeV produisent simultanément des impuretés et des dégâts d'irradiation. La structure créée, ainsi que sa stabilité en fonction de la température de recuit dans le microscope ont été observées par microscopie électronique à transmission. Les mesures ont montré que pour des températures d'irradiation inférieures à 230°C , la structure a une cinétique d'évolution lente à toutes les températures de recuit alors que pour des températures d'irradiation supérieures, on observe une croissance rapide des bulles d'He.

(Le travail a été réalisé avec l'aide du Fonds National de la Recherche Scientifique et du Million du Président du Conseil des EPF.)

Etude par mesures ultrasonores de la mobilité des dislocations

M. Bujard, G. Gremaud, W. Benoit

Institut de Génie Atomique, EPFL, PHB-Ecublens, 1015 Lausanne

La mobilité d'une dislocation dans un métal est contrôlée par les mécanismes d'interaction entre la dislocation et les obstacles (mobiles ou immobiles) s'opposant à son déplacement.

La mesure de la variation de l'absorption ultrasonore $\Delta\alpha$ en fonction d'une contrainte σ appliquée à l'échantillon permet en principe de déterminer le mécanisme d'interaction entre les dislocations et les obstacles.

La présentation portera sur les particularités spécifiques que présentent les courbes $\Delta\alpha(\sigma)$ suivant qu'elles résultent d'un mécanisme d'interaction entre dislocations et obstacles mobiles ou immobiles; l'exploitation de ces caractéristiques dans le cas des résultats obtenus dans l'aluminium sera également présentée.

Interactions dislocations-impuretés intercalaires dans le graphite

P. Millet, R. Schaller

Institut de Génie Atomique, EPFL, PHB-Ecublens, 1015 Lausanne

Aux basses températures, le frottement intérieur du graphite présente une brusque augmentation entre 180 et 250K, associée à une variation anormale du module élastique.

Ces phénomènes sont accentués par dopage du graphite en molécules de H_2SO_4 ou HN_3 . D'autre part, des observations de microscopie électronique à transmission ont révélé une variation de la mobilité des dislocations dans le même domaine de température.

En conséquence, nous avons interprété ces résultats en terme d'interactions dislocations-intercalaires. Aux basses températures, les dislocations sont ancrées par les intercalaires. A hautes températures, les forces d'interactions donnent lieu à un frottement intérieur de type hystéritique.

Résistivité électrique due aux défauts d'irradiation dans l'Aluminium

F. Paschoud, R. Gotthardt

Institut de Génie Atomique, DP, EPFL, 1015 Lausanne

Des protons de 600 MeV créent dans l'aluminium non seulement des défauts cristallins, comme des intersticiels ou des lacunes, mais aussi des éléments nouveaux, comme de l'hélium, de l'hydrogène, du sodium où du magnésium. La microscopie électronique à transmission montre des bulles distribuées homogènement dans le cristal, remplies par une partie d'hélium créé. Pour avoir des informations sur les autres éléments, leur arrangement, leur mobilité et leur interaction mutuelle, des mesures de résistivité électrique résistive en fonction de la température de recuit ont été effectuées. La résistivité était quasiment constante jusqu'à une température de 500°C.

A Study of cross slip in the F.C.C. structureJ. Bonneville and J.L. MartinInstitut de Génie Atomique, EPFL, 1015 Lausanne

A few years ago a new experimental technique was developed in order to investigate the intrinsic features of cross slip in f.c.c. crystals. This paper reports the application of this technique to the measurement of the activation volumes bound to this mechanism in copper at temperatures between 293K and 473K. The experimental results are consistent with the Friedel Escaig model which considers an activation site the size of which is comparable to the square of the dissociation width of screw dislocations.

Creep of [112] Al single crystalsM. Carrard and J.L. MartinInstitut de Génie Atomique, EPFL, PHB-Ecublens, 1015 Lausanne

The slip geometry and creep substructure of [112] Al single crystals at intermediate and high temperatures are compared, in order to detect whether one or two different rate controlling mechanisms exist. Below 200°C, the dislocations slip on the two primary (111) planes, whereas from 200°C to the melting point they slip on the unusual (001) plane; the corresponding substructures are, in consequence, very different. Therefore slip on (001) seems to be important in the transition from intermediate to high temperatures. (The financial help of "Fonds National Suisse" is greatfully acknowledged)

Status of the Zurich $\bar{\nu}_e$ -Mass Experiment

E. Holzschuh, W. Kündig, J.W. Petersen, R.E. Pixley, H. Stüssi
Physics Institute, University of Zurich, 8001 Zurich and Swiss
Institute for Nuclear Research, 5234 Villigen

During the past 12 months we have been carrying out test measurements to understand better and to improve the operation of our beta spectrometer. We report here on a 48 hour tritium measurement with 25 eV resolution. Some 6 million events were registered between 17700 and 19500 eV. Although the data indicate a mass smaller than 20 eV for $\bar{\nu}_e$, further measurements are necessary to check the reliability of this result.

KOND V : Neue Materialien, Polymere, Thermodynamik

MASSENSPEKTROMETRISCHE UNTERSUCHUNG DER VERDAMPFUNG VON α -HgI₂ KRISTALLEN
FUER γ -STRAHL-DETEKTOREN

M. Piechotka, E. Kaldis, Laboratorium für Festkörperphysik ETH Zürich,
CH-8093 ZÜRICH, Switzerland

Inhalt: Im Hinblick auf die bis jetzt unbekannten Defekte, die die Funktion der γ -Detektoren aus HgI₂ negativ beeinflussen, haben wir die Thermodynamik der Verdampfung von HgI₂ untersucht. Die Massenspektren eines HgI₂-Molekularstrahls aus einer Knudsenzelle wurden im Temperaturbereich 40-140°C und für Beschleunigungsspannungen 12-70 eV aufgenommen. Klastogramme ergeben eindeutig die Verdampfungsreaktion: HgI_{2(f)} = HgI_{2(d)}. Die Temperaturabhängigkeit des Dampfdruckes zeigt bei $t \approx 70^\circ\text{C}$ eine starke Änderung der Verdampfungsenthalpie von $\Delta H = 15.1 \text{ kcal/mol}$ ($t < 70^\circ\text{C}$) auf $\Delta H = 26.4 \text{ kcal/mol}$ ($70 < t < 130^\circ\text{C}$), die auf eine bis jetzt unbekannte Phasenumwandlung hinweist. Diese könnte die Erklärung für die Entstehung von Defekten in den α -HgI₂ Kristallen geben.

1. Einführung

Einkristalle der roten, tetragonalen α -Phase des Quecksilberjodides, HgI₂, werden als Zimmertemperatur X- und γ -Strahl-Detektoren benutzt [1]. Leider liegt die Ausbeute von Kristallen mit guter Detektorqualität unter 5%. Ueber die Ursachen weiss man nur, dass Defekte in HgI₂ existieren, die die Beweglichkeit der positiven Ladungsträger stark herabsetzen. Natur und Ursprung dieser Defekte ist aber nicht klar. Zwischen mehreren Methoden, die für die Einkristallzüchtung von HgI₂ existieren, gibt die Züchtung aus der Dampfphase bis jetzt die besten Ergebnisse. Wir haben deshalb eine systematische Untersuchung des Verdampfungsprozesses unternommen und einen Effekt entdeckt, der für die Entstehung der Defekte verantwortlich sein könnte.

2. Experimenteller Teil

Ein Molekularstrahl wurde mit einer Knudsenzelle in einer UHV Apparatur erzeugt und mit einem QMG-511 Quadrupolmassenspektrometer analysiert. Schwierigkeiten bereitet die Chemiesorption und teilweise Oberflächenreaktion der Ionisationsquelle mit Jod. Diese machte eine Diskriminierung des Jod-Signales mit einem Chopper notwendig.

HgI_2 enthält organische Verunreinigungen [2,3]. Es wurden deshalb kohlenwasserstoffarme Proben speziell hergestellt. Quecksilber "Suprapur" (Merck) und Jod aus der Zersetzung von Kupferjodid, CuI , bei 750°C wurden zur Reaktion gebracht. CuI wurde gewählt, weil man erwartet, dass seine kubische dicht gepackte Struktur keinen Einbau von Kohlenwasserstoffen erlaubt, im Gegensatz zu den Schichtstrukturen von Jod und HgI_2 .

3. Ergebnisse

Der Molekularstrahl von HgI_2 wurde durch einen Elektronenstrahl von 70eV in einer "cross-beam" Ionenquelle ionisiert. Unter diesen Bedingungen findet nicht nur eine Ionisierung sondern auch weitgehende Fragmentierung der HgI_2 Moleküle statt. Abb. 1 zeigt das Klastogramm der Dampfspezies. Die Konzentration (in %) ist als Funktion der Ionisationsspannung gezeigt. Mit abnehmender Spannung steigt nur die Konzentration vom HgI_2 -Ion. Dies bedeutet, dass nur dieses Ion ein "parent ion" ist, d.h. zum thermodynamischen Gleichgewicht der Verdampfung gehört. Demnach können wir die Verdampfungsreaktion als eine molekulare Sublimation formulieren:

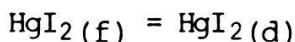


Abb. 2 zeigt das Produkt von (Ionenstrom x Temperatur) gegen die reziproke Temperatur der Knudsenzelle. Das Produkt ($I \cdot T$) ist bei gegebener Temperatur zum Dampfdruck von HgI_2 proportional. Die absoluten Werte des Dampfdruckes (rechte Skala) wurden durch Eichung mit elementarem Hg bestimmt (Kurve a). Auf der HgI_2 -Dampfdruckkurve (c) sieht man zwei Neigungsänderungen. Die eine bei ungefähr 130°C ist zu erwarten, weil die bekannte Phasenumwandlung von rotem tetragonalem $\alpha\text{-HgI}_2$ zu gelbem rhombischem $\beta\text{-HgI}_2$ bei dieser Temperatur stattfindet [4]. Die andere bei ca. 70°C ist aber völlig unerwartet.

Um zu prüfen, ob dieser Knick kein Artefakt ist, haben wir zusätzliche Messungen mit einer Knudsenzelle mit grösserem Effusionsloch durchgeführt. Die viel bessere Statistik hat den Knick bei ca. 70°C eindeutig bestätigt (Kurve b in Abb. 2). Dem Knick entspricht eine Änderung der Sublimationsenthalpie von 15.1 kcal/mol auf 26.4 kcal/mol. Falls diese Änderung mit einer Volumenumwandlung des Gitters verbunden wäre, würde man einen Wärmeeffekt bei ca. 70°C erwarten. Ein Versuch, einen solchen Wärmeeffekt durch Differential Scanning Calorimetry (DSC) nachzuweisen, ist nicht gelungen.

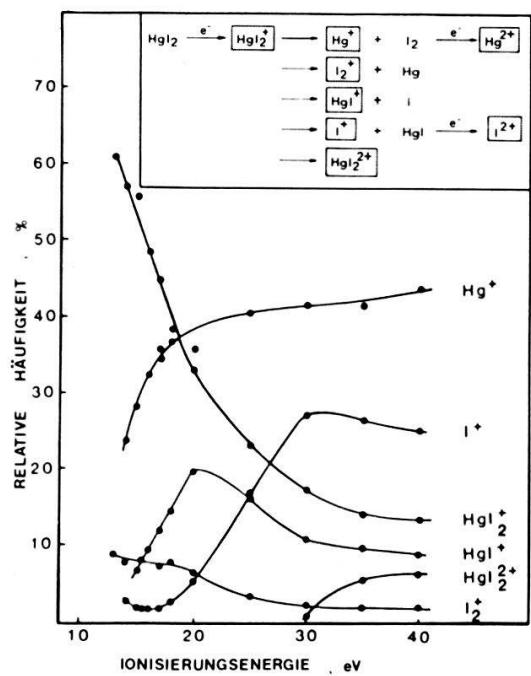


Abb. 1

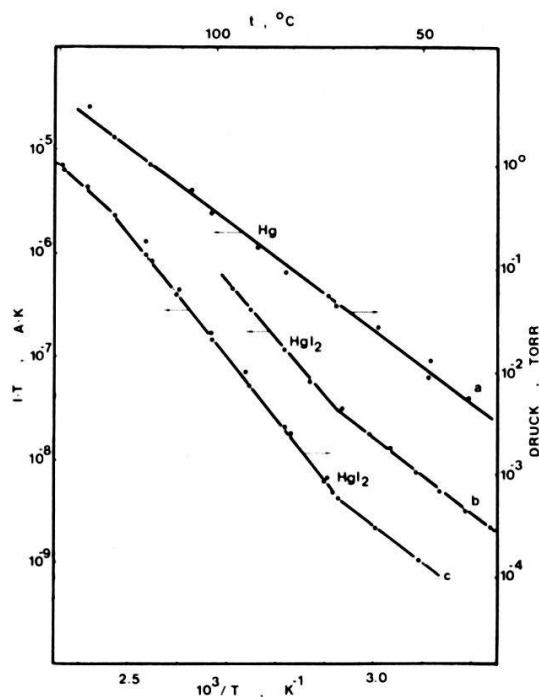


Abb. 2

Abb. 1 Zerfallschema von HgI_2 in der Ionenquelle und die relative Häufigkeit der entsprechenden Ionen als Funktion der Ionisierungsenergie (Klastogramm).

Abb. 2 Temperaturabhängigkeit des Dampfdruckes von Quecksilber (a) und von Quecksilberjodid (c). Kurve (b) wurde mit einer nicht geeichten Knudsenzelle gemessen, deshalb ist ihre Lage gegenüber der Druckkoordinate nicht bekannt.

Zwei Erklärungen können diskutiert werden: a) eine sehr langsame Phasenumwandlung zweiter Ordnung, b) eine Oberflächenrekonstruktion im Sinne einer strukturellen oder stöchiometrischen Änderung der Oberfläche. Der thermische Effekt dürfte in diesem Fall sehr klein sein und durch DSC nicht nachweisbar. Eine Oberflächenrekonstruktion ist im Einklang mit elektrischen Eigenschaften der Detektoren. Untersuchungen in EG&G in Santa Barbara haben nämlich gezeigt, dass eine hohe Konzentration von Defekten an der Oberfläche existiert [5].

Quecksilberjodid besitzt bei der Temperatur der vermuteten Oberflächenrekonstruktion einen Dampfdruck von $5 \cdot 10^{-4}$ Torr. Alle Elektronenstrahluntersuchungsmethoden scheiden deshalb leider aus. Zu der wichtigen praktischen Frage der Vermeidung dieser Umwandlung bei der Kristallzüchtung kann man folgendes sagen: es ist denkbar, dass trotz des hohen Dampfdruckes dünne Schichten von HgI_2 bei $t < 70^\circ\text{C}$ hergestellt werden können. Auch Dotierungen oder feste Lösungen könnten zu einer Unterdrückung der Phasenumwandlung unterhalb der Zimmertemperatur führen.

Die Autoren möchten sich bei der Eidgenössischen Stiftung zur Förderung der Schweizerischen Volkswirtschaft durch wissenschaftliche Forschung für die finanzielle Unterstützung bedanken, die diese Untersuchung ermöglicht hat.

4. Literatur

- [1] M. Schieber, M. Roth, W.F. Schnepple, J. Cryst. Growth, 65 353 (1983).
- [2] T. Kobayashi, J.T. Muheim, P. Waegli, E. Kaldis, J. Electrochem. Soc. 130, 1183 (1983).
- [3] M. Piechotka, J.T. Muheim, E. Kaldis, Poster presented at the 7th Int. Conf. on Crystal Growth, Stuttgart, BRD (1983).
- [4] Gmelins Handbuch der Anorganischen Chemie, 8. Aufl., Teil B, Lfr. 2, S. 814 (1967).
- [5] W.F. Schnepple, private communication to E. Kaldis.

THE METAL(CeH_2) - SEMICONDUCTOR(CeH_3) SOLID SOLUTIONS
AND THE Ce-H₂ PHASE DIAGRAM

M. Tellefsen, E. Kaldis and E. Jilek, Laboratorium für Festkörperphysik, ETHZ-CH-8093 Zurich, Switzerland

Abstract: The P-T-x phase diagram of the Ce-H₂ system has been determined by vapor pressure measurements within 820<T<1150°C. Members of the CeH₂-CeH₃ solid solution series were prepared and structurally characterized. In contrast to the literature it seems that there are several inflection points in the lattice parameter vs. composition curve reflecting changes of the physical properties.

1. Introduction

The light lanthanide hydrides are well known to exhibit a composition-dependent metal (LnH_2) to semiconductor (LnH_3) transition [1,2]. Further developments in LnH_x studies have revealed a number of temperature- and composition-dependent phenomena in the crystal structure and physical properties. A proper understanding of these systems has been deterred by the difficult task of preparing a well characterized mixed crystal series (LnH_x) under the necessary high purity control. The only reported method of single crystal growth for LnH_x systems is that employed by Libowitz et al. [3] for cerium hydride. They proposed a peritectic phase diagram despite only a scant amount of supporting data. Above the peritectic, crystal growth occurs by precipitation from the hydrogen saturated melt. We have systematically measured the Ce-H₂ phase diagram by performing highly sensitive P-x isotherm measurements within the range 820<T<1150°C. In this paper we report the construction of a new T-x phase diagram based on these results.

The CeH_x solid solutions have been generally accepted as a continuous series with a linear decrease in the cell parameter vs. x curve [4] (cubic fluorite structure, Fm3m). In contrast, a recent report by Knappe et al. [5] shows that the cell parameter drops quickly to a wide plateau 2.33<x<2.75 (see Fig. 2). This implies the existence of a two phase region, but neither P-x measurements nor x-ray analysis could confirm this explanation. Furthermore, these authors have observed a tetragonal distortion for $CeH_{2.33}$ [6] which is apparently related to the ordered superstructure reported by Titcomb et al. [7] for $CeD_{2.29}$. However, both of these compositions are quite different from the

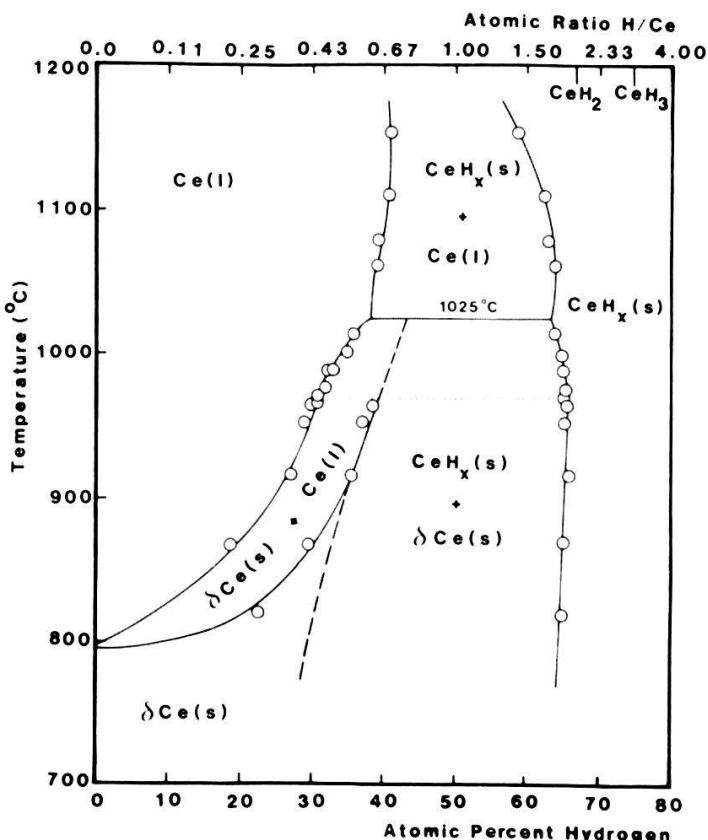
Fig. 1. The new T-x phase diagram for the CeH₂ system.

CeH_{2.5} expected from the symmetry of the superstructure. In an effort to resolve these several discrepancies we have re-investigated the CeH_x solid solutions, paying careful attention to purity control. We report here the presently existing results of the ongoing investigation. Measurement of P-x isotherms and preparation of all samples was accomplished in a double-walled quartz reactor, capable of P≤6 bar and T≤1150°C.

A detailed description of the entire apparatus is given elsewhere [8]. Both Debye-Scherrer and Gandolfi methods were used to obtain room temperature powder patterns from powdered samples and cleaved sample fragments, respectively. Direct analysis for hydrogen was accomplished according to a very accurate volumetric technique, described previously [9].

2. The Ce-H₂ Phase Diagram

Seventeen P-x isotherms were measured for the Ce-H₂ system in the range 820≤T≤1150°C. A new T-x phase diagram was constructed from these data and is shown in Fig. 1. The observation of plateaus in the P-x curves throughout the temperature range confirmed the peritectic nature of the diagram. T_{per} was located at the inflections in the outer boundaries at ≈1025°C and was confirmed by the observation of the solidified melt in CeH_{1.2} samples quenched from 1050°C. This value of T_{per} is slightly higher than the ≈1010°C proposed by Libowitz et al. [3]. Further comparison of the old and new phase diagrams reveals appreciable differences in the slopes and positions of the remaining boundaries [10]. A novel feature of the new diagram is the additional inflection in the outer boundaries at 970°C which also corresponds to the disappearance of the central phase boundary (at the dotted horizontal line).



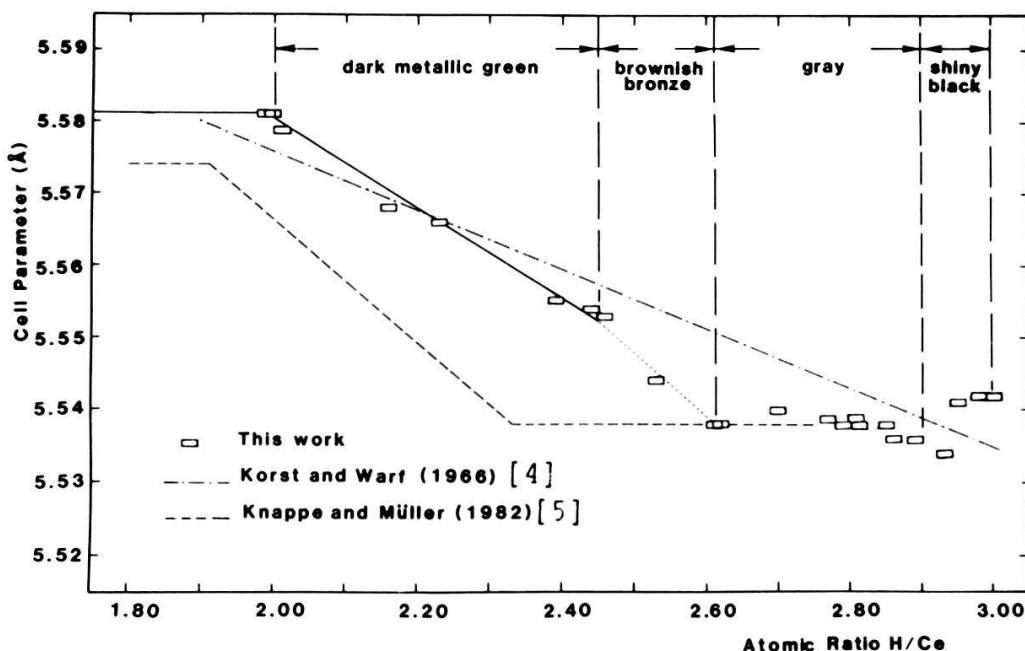


Fig. 2. The a vs. x curve for the CeH_x system. Colors of the various composition fields are shown above.

This suggests the existence of a previously unreported phase transformation. Although the nature of this transformation is still unknown, a similar inflection has been observed by us in the Pr-H_2 system [11].

3. The $\text{CeH}_2\text{-CeH}_3$ Solid Solution Series

In order to compare our results with the existing data of Knappe et al. [5], we have prepared a series of samples with different stoichiometries at 500°C . The color of CeH_x changes gradually as a function of composition as shown above in Fig. 2. Samples from the two-phase region ($x < 2.0$) showed clearly a segregation of metal from cerium dihydride (dark metallic green). This confirms that pure CeH_2 is green in color, since metallic cerium is a more active oxygen getter than the hydride. Samples resulting from isotherm measurements at $T > 820^\circ\text{C}$ had generally compositions with $x > 2.85$ and showed a shiny black color. These changes have not been reported before in the literature. We attribute them to a shift of the plasma resonance with decreasing free-carrier concentration in the CeH_x series.

The results of the cell parameter measurements are shown in Fig. 2. The new curve shows four separate composition fields corresponding to the color changes shown above. In the first field ($2.00 < x < 2.45$) the lattice constant

decreases linearly. The rate of decrease is greater in the second region ($2.45 < x < 2.61$) and the only point within this field shows a tetragonal splitting. A fit of the x-ray data based on a fcc lattice yielded $a = 5.543(1)$ Å and $c = 5.561(1)$ Å. This composition ($\text{CeH}_{2.53}$) is in good agreement with the ideal composition of 2.50 for the reported ordered superstructure [7].

In the range $2.61 < x < 3.00$ the changes in the lattice constant are small. In order to find out whether the relative flatness of the curve in the region $2.61 < x < 2.90$ is due to a two-phase region we have measured the P-x isotherms of the Ce-H₂ system at 200, 350 and 500°C. No additional plateaus could be observed up to 6 bar H₂. However, the curve at 500°C showed unusually strong curvature, which could possibly indicate changes in the defect structure as a precursor stage of a phase transition. We conclude, therefore, that the flattening of the a vs. x curve is not the result of a broad two-phase region, but rather the result of antagonizing forces of attraction and repulsion. In the range $x < 2.61$ attractive forces predominate and the interatomic distances decrease. At $x > 2.61$ the octahedral (interstitial) sites become much more filled. The repulsive interactions become comparable, such that the lattice constant appears to be only slightly composition-dependent.

Changes in color and slope of the a vs. x curve indicate in CeH_x the existence of four fields with different physical properties. In general, composition driven metal-semiconductor transitions are not continuous. Therefore, narrow miscibility gaps are expected between at least some of the fields.

4. References

- [1] B. Stalinsky, Bull. Acad. Pol. Sci. Cl. III 5, 997 (1957).
- [2] G.G. Libowitz, J.G. Pack, J. Chem. Phys. 50, 3557 (1969).
- [3] G.G. Libowitz, J.G. Pack in: Proc. ICCG-I, H.S. Peiser Ed. Oxford, Pergamon (1966) p. 129.
- [4] W.L. Korst, J.C. Warf, Inorg. Chem. 5, 1719 (1966).
- [5] P. Knappe, H. Müller, Z. Anorg. Allg. Chem. 63, 63 (1982).
- [6] P. Knappe, H. Müller, H.W. Mayer, J. Less. Comm. Met. 95, 323 (1982).
- [7] C.J. Titcomb, A.K. Cheetham, B.E.F. Fender, J. Phys. C 7, 2409 (1974).
- [8] R. Bischof, E. Kaldis, M. Tellefsen, J. Cryst. Growth, (1985) in press.
- [9] R. Bischof, E. Kaldis, I. Lacis, J. Less Comm. Met. 94, 117 (1983).
- [10] M. Tellefsen, E. Kaldis, R. Bischof, Thermochim. Acta (1985) in press.
- [11] R. Bischof, E. Kaldis, M. Tellefsen, J. Less Comm. Met., to be published.

Etude par RPE continue et pulsée de poudres $TiO_2:V^{4+}$ en phases anatase et rutile

R. Gallay, J.J. van der Klink et J. Moser*

Institut de Physique Expérimentale, EPFL, CH-1015 Lausanne

* Institut de Chimie-Physique, EPFL, CH-1015 Lausanne

Les propriétés électroniques des petites particules semiconductrices sont remarquables en vue de la photodécomposition de l'eau. Nous avons étudié (par RPE) le système $TiO_2:V^{4+}$ ($s = \frac{1}{2}$) en poudre fine, dans la phase anatase et rutile. La structure de l'environnement de l'impureté paramagnétique est caractérisée par le spectre de RPE. Les propriétés dynamiques des agrégats sont mis en évidence par l'étude des processus de relaxation du spin électronique, mesurés par la technique des échos de spins.

XPS studies of HfN films

A.J. Perry* and L. Schlapbach

Laboratorium für Festkörperphysik, ETH-Z, CH-8093 Zürich.

The Group IV nitrides are well known as being covalent yet with high hardness, melting points and electrical conductivity; they can exist over a range of stoichiometry. TiN and ZrN have been studied extensively (1) and their properties can be understood in terms of their electronic structures.

We report first measurements on HfN films prepared by CVD and by activated PVD methods. We find them to be metallic. Due to charge transfer, the Hf core levels are shifted to higher binding energies. This shift varies slightly with stoichiometry.

(1) H. Höchst et al. Phys. Rev., 1982 25 7183.

* Visiting Scientist.

Mass-Spectrometric Investigations of (3-methylthiophene) Films

H. Kiess, W. Kobel, M. Egli and R. Keller, Laboratories RCA Ltd.
Badenerstrasse 569, 8048 Zürich

3-Methylthiophene undergoes similarly to pyrrole electrochemical polymerization to yield oxidized polymer films of high conductivity ($\sigma_{RT} \approx 10^4$ S/m). The electrolytic medium we used consisted of propylene carbonate or methylene chloride as solvents and NBu_4BF_4 as supporting salt. We could show that even after drying for several days in vacuum the films still contained up to 20% (w/w) of the solvent. The solvent could be removed by heating the films in vacuo up to 180°C. Simultaneous mass spectrometric studies of the volatile products show that the solvents and products related to BF_4^- are released at different temperatures. Nevertheless the preparation of conducting solvent-free films is encountered with difficulties using the common electrochemical methods.

Bildungsenthalpien von Tm_xSe aus der Fluorverbrennungskalorimetrie als Funktion der Nichtstöchiometrie

H. Psychiger, B. Fritzler, E. Kaldis, HPF ETH Zürich, 8093 Zürich
Zur Bestimmung von Bildungsenthalpien wurde ein Fluorverbrennungskalorimeter aufgebaut. Die gesamte Anlage besteht aus einer Zweikammerverbrennungsbombe, einem Isoperibolkalorimeter, einem Manifold zur Handhabung von Fluor und einer Destillationseinheit zur Reinigung von kommerziellem Fluor. Mit diesem System wurde die Bildungsenthalpie von gemischt valentem Tm_xSe ($0.87 < x < 1.04$) gemessen. Die ersten Ergebnisse zeigen eine dramatische Variation (42%) der Bildungsenthalpie für die "normale" metallische $Tm_x^{3+}Se$ Phase ($0.87 < x < 0.93$) an der Grenze der Mischungslücke zur Valenzfluktuierten Phase ($0.95 < x < 1.04$). Man könnte sich vorstellen, dass solche Kristalle explodieren sollten. Dass dies nicht geschieht, deutet auf eine sehr starke Zunahme der Entropie, die dadurch die freie Energie stabilisiert.

Das T-x Phasendiagramm des valenzinstabilen Tm_xSe

H. Psychiger, E. Kaldis, HPF ETH Zürich, 8093 Zürich

Die Valenz von Tm_xSe kann als Funktion der Nichtstöchiometrie variiert werden. Für die Zuordnung der intermediären Valenzwerten sind die Grenzen des Homogenitätsbereiches sehr wichtig. Wir haben unseres Phasendiagramms verfeinert in dem wir abgeschreckte Präparate untersucht haben. Die Gitterkonstanten zeigen dass bei $T > 1900^\circ C$ kein Homogenitätsbereich existiert für $0.94 \leq x \leq 1.05$, sondern nur die Endzusammensetzungen $Tm_{0.94}Se$ (normale Valenz) und $Tm_{1.04}Se$ (Valenzfluktuation) stabil sind. Während der Abschreckung (Abkühlung) findet die Reaktion zur intermediären Valenz statt, vermutlich über den Phasenübergang bei $1700^\circ C$.

KOND VI : Supraleitung, Metalle, Varia

ETUDE XPS de la chimisorption sur le Titane

P.-A. Mäusli, P. Bloch, S.G. Steinemann

Institut de Physique Expérimentale, Université de Lausanne

Le titane se recouvre spontanément d'une couche de TiO_2 lorsqu'il est exposé à l'oxygène à la température ambiante. Cette couche confère au métal sa grande résistance à la corrosion et est également actif en catalyse. Le dioxyde de titane est un semi-conducteur de type n à large bande (Levin et al. 1979). Ses propriétés électriques sont ordinairement dominées par les nombreux défauts de sa structure qui n'est, d'ailleurs, pas très bien définie et se présente sous la forme d'anatase, de rutile ou même d'amorphe. Lorsque cette surface est présentée à un milieu aqueux, elle montre une stabilité remarquable de sa couche de passivation. Il est important de comprendre comment interagit l'électrolyte avec celle-ci pour comprendre cette stabilité.

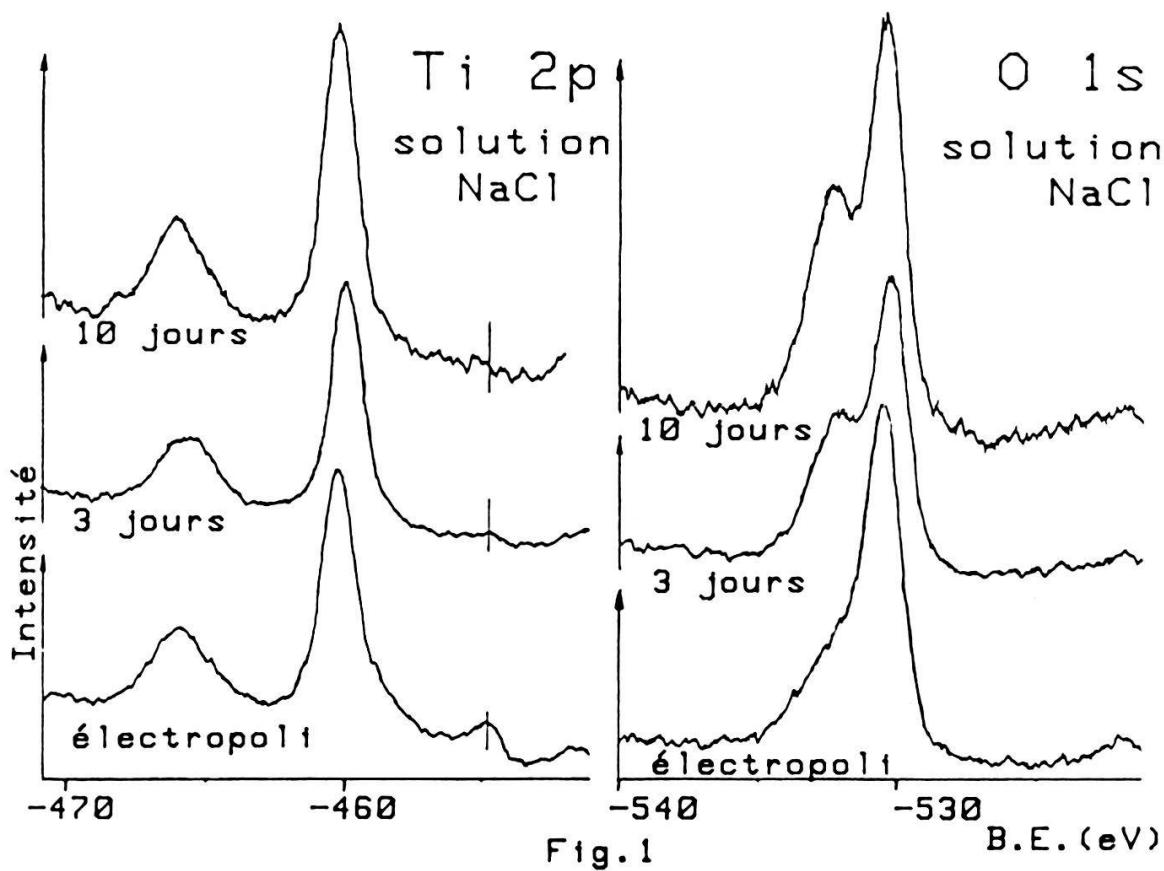


Fig.1

Nous avons exposé des échantillons de titane à des bains corrosifs pendant des temps croissants. A l'aide de la spectroscopie des photoélectrons (ESCA), nous avons suivi l'évolution de la couche d'oxyde ainsi que l'adsorption sur celle-ci. Des plaquettes de titane de pureté commerciale ont été préparées par polissage mécanique suivi d'un polissage électrolytique pour assurer des conditions initiales bien définies. La figure 1 présente des spectres de l'oxygène ls d'échantillons soumis à une solution de NaCl (0.9%, 40°C). On remarque les éléments suivants: a) Le pic correspondant à l'état électropoli présente une asymétrie. Le maximum à 530.5 eV, est caractéristique de l'oxygène du cristal. La déconvolution de la queue montre qu'il existe un pic vers 532 eV, témoin d'un état de surface sur une épaisseur de l'ordre d'une couche monomoléculaire. Cet oxygène lié est stable et le spectre n'est pas modifié par un bombardement ionique, ni par un chauffage à l'air à 180°C. C'est une chimisorption. b) L'exposition au bain fait croître le pic lié à l'oxygène de surface. La figure 2 en résume l'évolution. Une brusque augmentation enregistrée après 100 jours est probablement associée à l'apparition de micro-organismes dans le bain et constitue un effet parasite. Cet état est

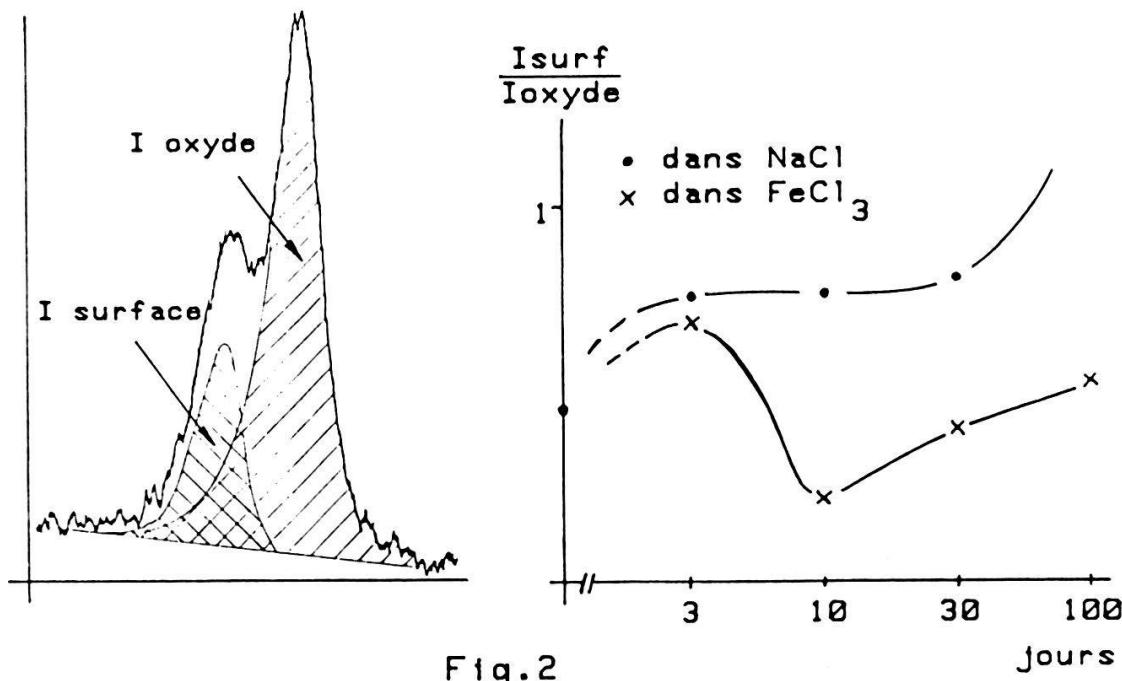


Fig. 2

beaucoup moins stable que celui évoqué sous a), car il est éliminé par un bombardement ionique et réduit par chauffage à l'air. Il est toutefois stable dans le vide ou lorsqu'il est placé plusieurs semaines dans un dessicateur. L'épaisseur de cette couche peut atteindre 15 Å. Cette adsorption dépend fortement du milieu aqueux et des ions présents. Des échantillons identiques ont été soumis à une solution de chlorure de fer à 6%, pour laquelle le pH est de 1.5 et où la solubilité du TiO₂ est connue pour être beaucoup plus grande que dans un milieu neutre. Dans ces conditions, l'adsorption n'est pas stable (fig.2). Les échantillons électropolis montrent toujours un petit pic caractéristique du Ti métallique sous la couche d'oxyde, ce qui permet d'en mesurer l'épaisseur; on l'estime à 4 nm. Des mesures électrochimiques (Steinemann 1984) démontrent que cette couche croît lentement, de l'ordre d'un demi Å par jour, en milieu neutre. L'adsorption est donc essentiellement responsable de l'épaississement apparent de la couverture superficielle, et non la croissance de l'oxyde. En milieu acide oxydant, l'oxyde doit se reconstituer au fur et à mesure de sa dissolution, car aucun amincissement de celui-ci n'a pu être mis en évidence.

Nos observations correspondent bien avec le modèle que Boehm (Boehm, 1971) a proposé de la surface du TiO₂ à partir de mesures d'absorption et de désorption effectuées sur des poudres en milieu aqueux (Parfitt, 1976). Les molécules de H₂O adsorbées se disloquent, et du transfer résulte 2 types de sites OH: a) les sites doublement coordonnées au titane et qui présentent un caractère acide et b) les sites simplement coordonnés qui présentent un caractère basique. Cette configuration confère à la surface des propriétés amphotères, d'où dépendent l'adsorption de molécules d'eau et d'ions, et dont les paramètres sont contrôlés par le pH. La couche chimisorbée mise en évidence par les spectres ESCA peut être assimilée à cette couche d'ions hydroxyles et d'eau coordonnée à ceux-ci. Pour ces derniers, l'adsorption est moins stable

et dépend du milieu électrolytique. Une expérience récente faite à Berne (Steinemann et Perren, 1984) montre que l'os et les tissus adhèrent au Ti. Nous pensons que ce résultat surprenant doit pouvoir être expliqué par une chimisorption de protéines; l'énergie de la liaison globale de la couche est suffisante pour expliquer la force d'adhésion mesurée par les chercheurs de Berne. On se propose d'examiner cette hypothèse sur l'exemple d'acides aminés et la formation de chélates.

Références:

- 1) S.G. Steinemann, Titanium 84 Int. Congr. München 1984
- 2) S.G. Steinemann, S.M. Perren DVM Arbeitskreis Implantate Berlin 1984
- 3) H.P. Boehm Disc. Far. Soc. 52, 264, 1971
- 4) G.D. Parfitt Prog. Surf. Membrane Sc. 11, 181, 1976
- 5) G. Levin, C.J. Rosa, Z. Metallkunde 70 (9), 601, 1979, Z. Metallkunde 70 (10), 646, 1979

PROPRIETES MAGNETO-ELASTIQUES DES INVARS

G.-P. Renaud et S.G. Steinemann, Institut de Physique Expérimentale, Université de Lausanne, CH-1015 Lausanne-Dorigny

Abstract: Pressure derivatives of elastic constants have been measured for Fe-Ni Invar alloys. Longitudinal and shear mode gamma's are obtained from which the magnetic contributions of intrinsic and non-intrinsic type are extracted. Anomalies beyond the Curie temperature are explained by magnetic fluctuations coupled to volume thermal fluctuations.

1. Definitions

La fonction de Grüneisen classique relie le coefficient de dilatation thermique β à la chaleur spécifique dans les solides, telle que

$$\gamma(T, V) = \frac{\beta K_T V}{c_V} \quad (1)$$

Une fonction de Grüneisen généralisée est définie dans le cadre de la dynamique du réseau [1]. Elle exprime, pour chaque mode, la dépendance en volume des fréquences des phonons, telle que

$$\gamma(\vec{k}, s) = - \frac{\partial \ln \omega_s(\vec{k})}{\partial \ln V} \quad (2)$$

Pour les grandes longueurs d'onde $\omega_s(\vec{k}) = k \cdot v_s$ où $v_s = (c_s/\rho)^{1/2}$, c_s étant la constante élastique associée du mode. D'où

$$\gamma_s = \frac{1}{3} - \frac{\partial \ln v_s}{\partial \ln V} = - \frac{1}{6} - \frac{1}{2} \frac{\partial \ln c_s}{\partial \ln V} \quad (3)$$

2. Mesure des coefficients de pression des constantes élastiques

La méthode standard de superposition des échos d'impulsions d'ondes ultrasonores (10 MHz) est utilisée. Les échantillons ont une forme de prisme orienté selon [110] (dimension 8 x 8 x 15 mm³). Les coefficients de pression sont mesurés dans un récipient en

acier; la pression atteinte est de 7 Kbar et le tout est placé dans un électroaimant pour saturer magnétiquement l'échantillon (1T).

3. Fonctions de Grüneisen de mode

Utilisant la relation (3), les gammes ont été obtenus à partir de dc/dp . Un mode de volume pur est introduit par la relation $K = c_{12} - c_{44} - \frac{1}{3} c'$. Ce mode est équivalent à la définition classique de Slater [2]. La figure présente les résultats. Les γ_c et γ_c' montrent une décroissance monotone jusqu'à la température de Curie. Les contributions magnétiques suivent l'allure de l'aimantation. Par contre, pour γ_c et γ_K , on observe un maximum à T_c . Cette anomalie magnétique comporte la part extrinsèque qui est due à la magnétostiction forcée. Les constantes élastiques étant séparables comme l'énergie libre, on peut obtenir la partie due au réseau c_r et la partie magnétique c_{ma} , d'où pour les gammes

$$c \gamma_{tot} = c_r \gamma_r + c_{ma} \gamma_{ma} \quad (4)$$

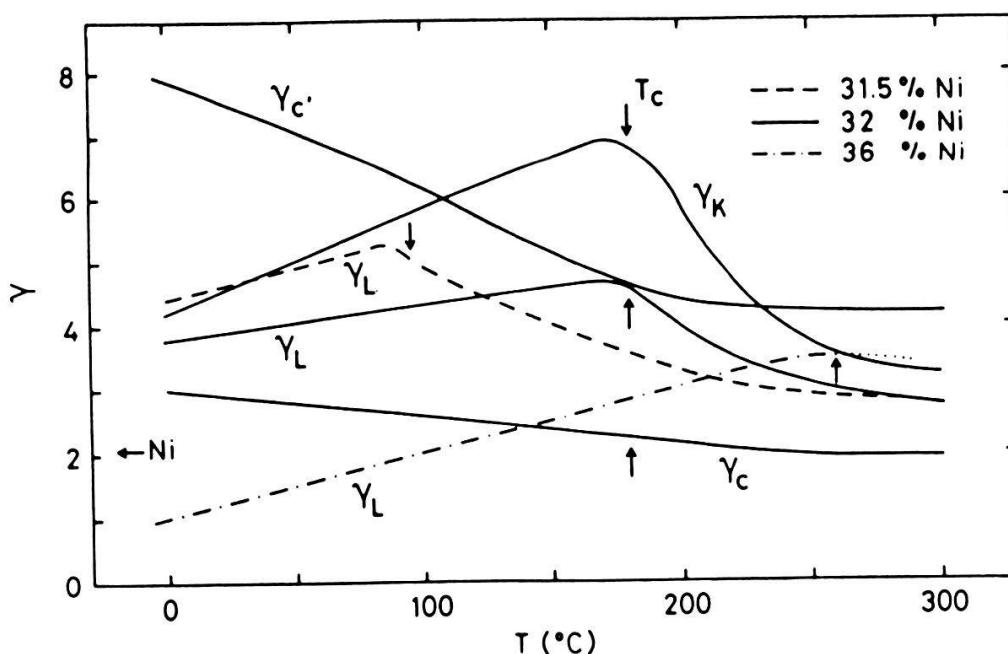


Fig. 1. Grüneisen de mode pour trois alliages de Fe-Ni.

Mode	$\gamma_{\text{tot}}(298K)$	$\gamma_{\text{tot}}(450K = T_c)$	γ_r	$\gamma_{\text{ma}}(298K)$	$\gamma_{\text{ma}}(T_c)$
Volume K	4.6	6.6	2	- 5	- 28
cis. c_{44}	2.9	2.1	1.9	- 21	≈ 0
cis. c'	7.5	4.6	4.2	- 17	≈ 0

Tableau. Gammas de mode pour l'alliage Fe-32% Ni.

Les gammas pour un alliage sont données dans le tableau. Ils sont tous très élevés, indiquant des effets magnéto-élastiques particulièrement grands. Le mode de volume peut être comparé à l'autre définition

$$\gamma_{\text{ma}} = \frac{\partial \ln T_c}{\partial \ln V} = \frac{K}{T_c} \frac{\partial T_c}{\partial p} \quad (5)$$

Par cette définition, on obtient $\gamma_{\text{ma}} = - 13$ pour le Fe-32% Ni [3].

4. Discussion

Le gamma magnétique est la propriété intrinsèque et fondamentale pour les invars. La définition (5) suggère de l'associer aux fluctuations thermiques. En effet, si ce gamma est grand, on s'attend à trouver des fluctuations magnétiques considérables. On peut estimer ces fluctuations dans le modèle de Debye. Partant du déplacement moyen des atomes $\langle u^2 \rangle^{1/2}$ et d'une longueur de cohérence $\langle \lambda \rangle$ définie en utilisant la fréquence moyenne dans le spectre de Debye, on obtient

$$3 \frac{\langle u^2 \rangle^{1/2}}{\langle \lambda \rangle} = \frac{\langle \Delta v^2 \rangle^{1/2}}{V} = K \langle \Delta p^2 \rangle^{1/2} \quad (6)$$

A partir des mesures expérimentales de $\langle u^2 \rangle^{1/2}$, on obtient $\langle \Delta T_c^2 \rangle^{1/2} = 180^\circ C$ pour les Fe-32% Ni. Cette valeur est grande, mais de telles fluctuations expliquent l'anomalie de γ au delà de T_c et la courbe d'aimantation très plate. Il en résulte un état mixte de régions paramagnétiques et ferromagnétiques, tel qu'il est admis dans plusieurs modèles de l'Invar [4]. L'origine thermique de cet état mixte est clairement établie ici.

5. Références

- [1] D.C. Wallace: Thermodynamics of Crystals, John Wiley.
Ed. New-York, (1972).
- [2] J.C. Slater: Introduction to Chemical Physics, McGraw-Hill Ed. New-York, 219 (1939).
- [3] H. Fujimori: Physics and Applications of Invar Alloys, Masuzen Ed. Tokyo, 80 (1978).
- [4] Y. Nakamura, IEEE Trans. on Magn. 12 4, 278 (1976)

Structure d'état intermédiaire dans les bicristaux supraconducteurs de première espèce. P. ZWEIACKER et L. RINDERER, Institut de physique expérimentale, Université de Lausanne, CH-1015 LAUSANNE.

Des structures d'état intermédiaire ont été produites et observées, par une méthode magnéto-optique, dans des échantillons de plomb, d'indium et d'étain en forme de plaques rectangulaires présentant un joint de grains longitudinal. Lorsqu'un courant électrique circule le long de l'échantillon, les domaines magnétiques se déplacent perpendiculairement au défaut du cristal et le franchissent. Dans les échantillons de plomb, il a été possible d'observer un ancrage des tubes de flux par le joint de grains, alors que dans l'étain et dans l'indium, les domaines magnétiques ont tendance à fusionner. Lorsque l'état intermédiaire comporte des filaments supraconducteurs, le joint de grains s'oppose à leur déplacement comme une barrière de potentiel. Ce phénomène a pu être filmé dans un échantillon d'indium.

Mesure de la vitesse de propagation longitudinale dans les supraconducteurs impurs de type I

J. Casas, E. Holguin et L. Rinderer. IPE de l'Uni de Lausanne, 1015 Dorigny

Par le passé, tel que l'ont signalé Posada et Rinderer (1) ainsi qu'Overton(2), la supraconductivité peut être détruite longitudinalement le long d'un fil parcouru par un courant inférieur au courant critique. Ce processus peut être surtout observé dans des échantillons impurs où les effets thermiques sont les plus importants. Nous présentons une nouvelle théorie qui donne une meilleure estimation de la vitesse de propagation de ce phénomène. Cette théorie permet de calculer la forme de l'interface Normal-Supraconducteur en supposant que la transition est en première approximation localement isothermique. Nous la comparons à quelques résultats expérimentaux.

(1) E. Posada and L. Rinderer, J. Low Temp. Phys. 21, Nos 3/4 (1975)

(2) W. C. Overton, J. Low Temp. Phys. 5, 397 (1971)

Comment on "The theory of vortex motion in an inhomogeneous superconducting film".

T. Takayama and L. Rinderer

Institut de Physique expérimentale, Université de Lausanne,
1015 Lausanne

A part of a theory (1) which was proposed to explain an interference effect (2) of a moving flux line lattice has been experimentally examined. The magnitude of a pinning force, which in the theory depends on whether electric fields or currents are externally fixed, seems not to depend on the situation.

1) A. Schmid and W. Hauger, J. Low Temp. Phys., 11, 667 (1973)

2) A. T. Fiory, Phys. Rev. Letters 27, 501 (1971)

High T_c Multifilamentary Nb-Al wires

Auteurs: D. Abukay and L. Rinderer

Université de Lausanne, Institut de Physique expérimentale,
1015 Lausanne-Dorigny

We have measured T_c onset values ranging over 19.2 - 20.3 K of multifilamentary Nb-Al wires fabricated by powder metallurgy process and heated for short time at temperatures greater than 2000° followed by annealing for 48-180 h at 700-750°C.

KOND VII : Elektronische Bandstruktur, optische Eigenschaften
Electron Interlayer States in Hexagonal Boron Nitride

A. Catellani, M. Posternak and A. Baldereschi[†]
EPF - Institut de Physique Appliquée, CH-1015 Lausanne.

Full potential self-consistent LAPW¹ calculations for hexagonal BN show the existence of empty interlayer states similar to those found in pure and intercalated graphite². This is the first report of interlayer bands in BN. These states are located between the occupied σ -bonding and the empty σ -antibonding bands. Their existence could be proved by investigating the low-energy excitations of the crystal or its inverse photoemission spectrum.

([†] Also at University of Trieste, Italy)

¹ H.J.F. Jansen and A.J. Freeman, Phys. Rev. B 30, 561 (1984)

² M. Posternak et al., Phys. Rev. Lett. 52, 863 (1984)
Th. Fauster et al., Phys. Rev. Lett. 51, 430 (1983)

Stabilité structurale d'agrégats métalliques d'après un modèle de potentiels interatomiques

L. Marville, Wanda Andreoni et J. Buttet
Institut de Physique Expérimentale, EPFL, CH-1015 Lausanne

On applique des potentiels interatomiques (à N-corps) récemment développés pour les métaux de transition cubiques centrés (*) (cc) à l'étude de la structure d'équilibre à $T = 0$ d'agrégats de ~ 10 à $\sim 10^3$ atomes. On examine la stabilité relative du dodecahèdre (cc), du cubooctahèdre (cfc) et de l'icosahèdre. En relaxant les positions atomiques par un calcul des forces, on obtient une contraction globale de maille et on prédit une forte variation de la relaxation en fonction du type d'atome (coin, surface, arête,...) dans l'agrégat. La relaxation normale des surfaces infinies (110), (100) et (111) est aussi évaluée.

(*) M.W. Finnis et J.E. Sinclair, Phil. Mag. A 50, 45 (1984).

Electronic properties of small silver clusters

Wanda Andreoni, T.H. Upton*, J.L. Martins[†]
Institut de Physique Expérimentale, EPFL, CH-1015 Lausanne

Using both *ab initio* density functional and configuration interaction (CI) methods, we have examined electronic properties of a series of small silver clusters (Ag_2 - Ag_4). We obtain ground state properties that are in substantial agreement between the two methods, and consistent with experiment when known. Discrepancies between the two approaches are largest for cohesive energies. We have also examined low-lying excited states for each of the clusters using CI, and have determined both geometries and excitation energies.

* Permanent address: Exxon Research and Engineering, Annandale, NJ, USA

+ Present address : Solar Energy Research Inst., Golden, CO, USA

Size effects on the electronic structure of aluminum clusters

F. Casula^{a)*}, Wanda Andreoni^{a)} and K. Maschke^{b)}

a) Institut de Physique Expérimentale, EPFL, CH-1015 Lausanne

b) Institut de Physique Appliquée, EPFL, CH-1015 Lausanne

The electronic structure of small aluminum clusters is studied through the diagonalization of model (tight-binding) hamiltonians. The effective parameters are fitted to the bulk density of states and reproduce the dispersion of surface states in the semiinfinite crystal. Clusters up to a few hundreds of atoms have been studied. The evolution of (partial) local density of states curves with the cluster size and their dependence on the specific geometry are investigated.

* Permanent address : Dipartimento di Scienze Fisiche, University of Cagliari, Cagliari, Italy

Spectroscopie d'électrons à haute résolution du Ce

F. Patthey, W.-D. Schneider, B. Delley et Y. Baer

Institut de Physique, Université, Rue A.-L. Breguet 1, CH - 2000 Neuchâtel

Nous avons mesuré par spectroscopie d'électrons UPS ($20 \text{ eV} < h\nu < 50 \text{ eV}$) les niveaux 4f du Ce dans ses phases α et γ . La haute résolution instrumentale ($\sim 20 \text{ meV}$) nous permet de mettre en évidence un dédoublement de 0.25 eV du pic proche du niveau de Fermi. Ce doublet est compatible avec le couplage spin-orbite du niveau $4f^1$. Dans cette optique la variation du rapport d'intensité de ces deux composantes est consistante avec l'augmentation de l'hybridation intervenant dans la transition $\gamma \rightarrow \alpha$ [1].

- [1] E. Wuilloud, H.R. Moser, W.-D. Schneider and Y. Baer
Phys. Rev. B 28, 7354 (1983)

Etude par spectroscopies d'électrons de composés du lanthane et du cérium

W.-D. Schneider, B. Delley, E. Wuilloud, J.-M. Imer et Y. Baer

Institut de Physique, Université, Rue A.-L. Breguet 1, CH - 2000 Neuchâtel

A l'aide des spectroscopies d'électrons XPS, BIS et EELS, nous avons étudié la structure électronique de quelques composés du lanthane et du cérium. La double structure observée dans les spectres XPS de coeur $3d_{5/2}$ peut être interprétée naïvement par l'existence dans les atomes de La et Ce à l'état fondamental de deux configurations $v^k 4f^n$ et $v^{k-1} f^{n+1}$, les états f étant localisés (valence mixte). Cependant les spectres XPS et BIS des bandes montrent clairement que cette interprétation est indéfendable. Le modèle de Gunnarsson et Schönhammer qui tient compte de l'interaction entre les différentes configurations dans l'état initial et final est capable de prédire parfaitement tous les spectres observés. Le concept de valence mixte paraît donc être totalement inadapté à de nombreux composés.

Inverse Photoemission an PdH_x

T. Riesterer, L. Schlapbach, J. Osterwalder
 Laboratorium für Festkörperphysik, ETH-Zürich, 8093 Zürich

XPS und UPS Messungen haben gezeigt, dass im Pd beim Hydrieren das Fermi niveau aus dem d Band in das energetisch höher liegende s-p Band verschoben wird und dass ca. 8 eV unterhalb E_F H-induzierte Zustände entstehen. Bandstrukturrechnungen sagen zusätzlich zu den Änderungen in der besetzten Zustandsdichte auch solche ca. 6 eV oberhalb E_F voraus. Unsere 9.7 eV BIS Messungen zeigen die Änderungen am Fermi niveau, können aber für (E-E_F) > 4 eV noch keine Aussagen machen, da dort die Hydridemission durch eine Shape-Resonanz des H₂-Moleküls überdeckt wird.

Elektronenstruktur von Hf₂Fe und Hf₂Fe-Hydrid, untersucht mit Photoemission

L. Schlapbach, Lab. für Festkörperphysik, ETHZ, 8093 Zürich
 G. Teisseron und P. Vulliet, CENG, F-38041 Grenoble

Die intermetallische Verbindung Hf₂Fe ist Pauli-paramagnetisch und absorbiert Wasserstoff bis zur Zusammensetzung Hf₂FeH₅. Dabei erscheint ein magnetisches Moment auf Fe.

Wir berichten über Analysen des Leitungsbandes und der Rumpf-elektronenniveaus von Hf₂Fe und Hf₂FeH_x mittels Photoelektronenspektroskopie (XPS, UPS). Die Proben würden in situ gebrochen oder hydriert und bei 100K analysiert. Die schnelle H₂-Desorption beschränkt die mögliche Energieauflösung im Leitungsband. Die Hf-Rumpfniveaus werden zu grösserer BE verschoben.

Optisch Nicht-Lineare Eigenschaften von Iodoform Komplexen

J. Fünfschilling, I. Zschokke-Gränacher
 Institut für Physik der Universität Basel, Klingelbergstr. 82, CH-4056 Basel

Iodoform Moleküle weisen eine recht grosse nichtlineare Suszeptibilität auf. In Mischkristallen mit geeigneten Partnern (z.B. Schwefel oder Urotropin) haben alle Iodoform Moleküle indentische Orientierungen. Wir haben festgestellt, dass diese organischen Kristalle sehr ausgeprägte optisch nicht-lineare Effekte wie Frequenzverdoppelung oder Pockels-Effekt zeigen. Die Effizienz für diese Prozesse ist dabei vergleichbar mit den höchsten bisher in organischen Materialien (z.B. MNA) gefundenen Werten und deutlich grösser als bei den gängigen anorganischen Kristallen (z.B. KDP).

KOND VIII : Amorphe Materialien, Kristallstruktur, Defekte, Zentren

NONPERIODIC ELECTRON MICROSCOPIC STRUCTURE IMAGES OF Al-Mn

H.-U. Nissen, T. Ishimasa, Laboratorium für Festkörperphysik, ETH ZÜRICH

R. Schlögl, P. Reimann and H.-J. Güntherodt, Institut für Physik, Universität BASEL, Switzerland

A nonperiodic crystalloid or quasicrystal phase has recently been found in an Al-Mn alloy rapidly quenched by melt spinning [1]. Selected area electron diffraction patterns showed an arrangement of sharp intensities corresponding to icosahedral point group symmetry ($m\bar{3}5$). It is known from group theory that icosahedral symmetry is inconsistent with the periodicity of a crystal and thus with a Bravais lattice. Levine and Steinhardt [2] have pointed out the high similarity of these diffraction patterns with the diffractogram calculated from the threedimensional Penrose Rhombus Pattern, a forced-nonperiodic tiling of 3D-space [3,4,5]. These calculated patterns correspond to the observed ones in their icosahedral symmetry and in the position and relative intensity of the main diffraction spots. In this paper structural information on the Al-Mn crystalloid will be presented resulting from a high resolution transmission electron microscopic investigation, especially from structure images made parallel to the fivefold and twofold symmetry axes.

High resolution structure images were taken with a JEOL JEM 200 C electron microscope fitted with a high resolution objective lens ($C_s=1.2 \text{ mm}$). The direction of incidence of the electron beam was adjusted by tilting the specimen into a position parallel to the 5-fold and 2-fold axes. An objective aperture was then inserted at the center of the diffraction pattern; this corresponds to a limiting radius of either 4.1 nm^{-1} or 7.5 nm^{-1} . Structure images were obtained from within the rounded crystalloid regions. Fig. 1(a) shows one structure image along a fivefold symmetry axis. Remarkable features of this image are its nonperiodicity on the atomic scale and the fact that most of the bright dots in the image are arranged as in regular decagons indicated in Fig. 1(a). Almost all positions of bright dots can be connected to form a network of interpenetrating regular decagons. If the bright dots are interpreted as indicating atom positions, the existence of the decagonal network implies that one particular bond length (i.e. the edge of one of the regular decagons) is

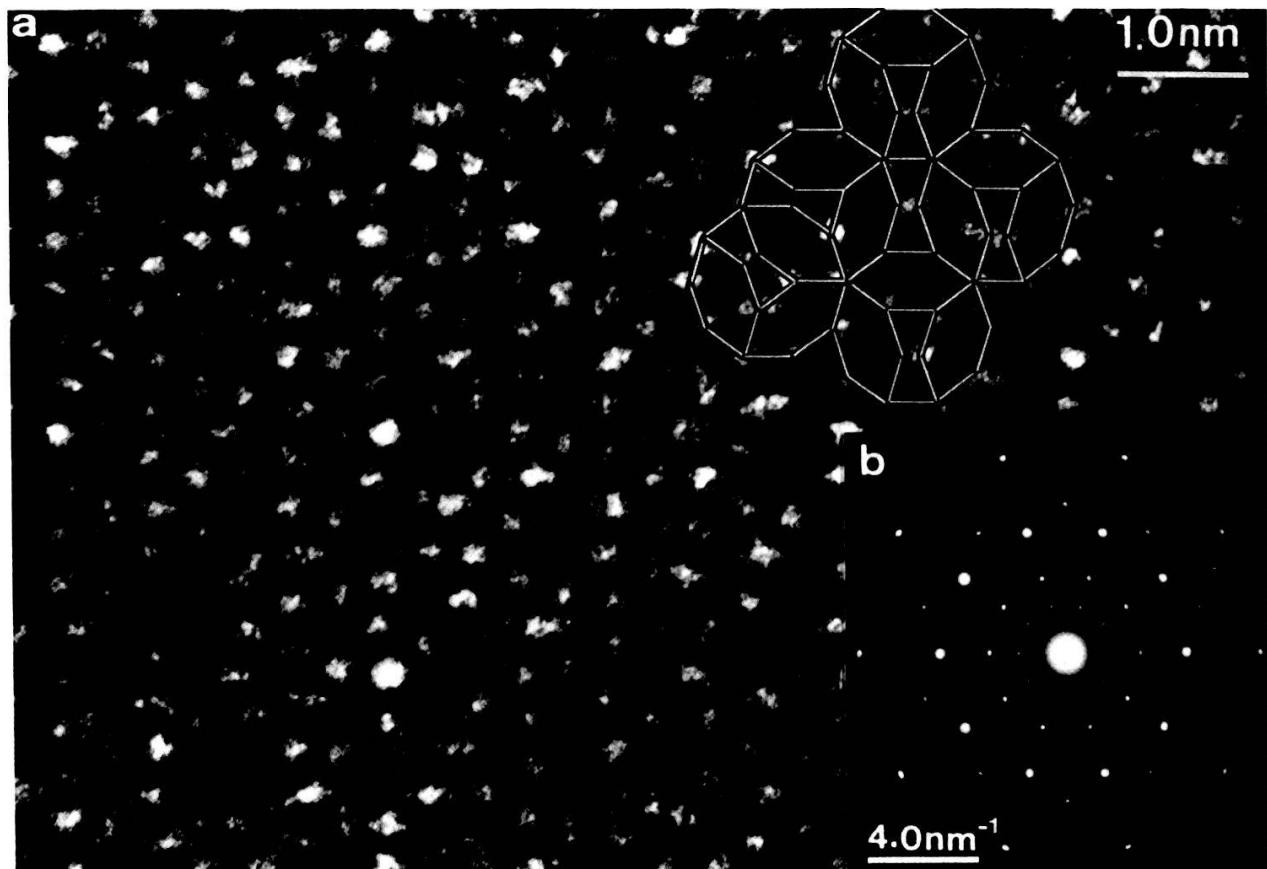


Figure 1(a) Structure image of Al-Mn crystallloid along fivefold symmetry axis. Planar tiling units are indicated in the upper right. Objective aperture radius 4.1 nm^{-1} . (b) Selected area diffraction pattern corresponding to (a).

very common in the structure and that only ten orientations of this bond are present in this structure projection. An optical diffraction pattern of this image (Fig. 2) shows tenfold symmetry corresponding to icosahedral point symmetry even when the radius of the laser beam used to obtain the optical diffractogram is reduced to 1.4 nm. However, for this radius the intensity of the

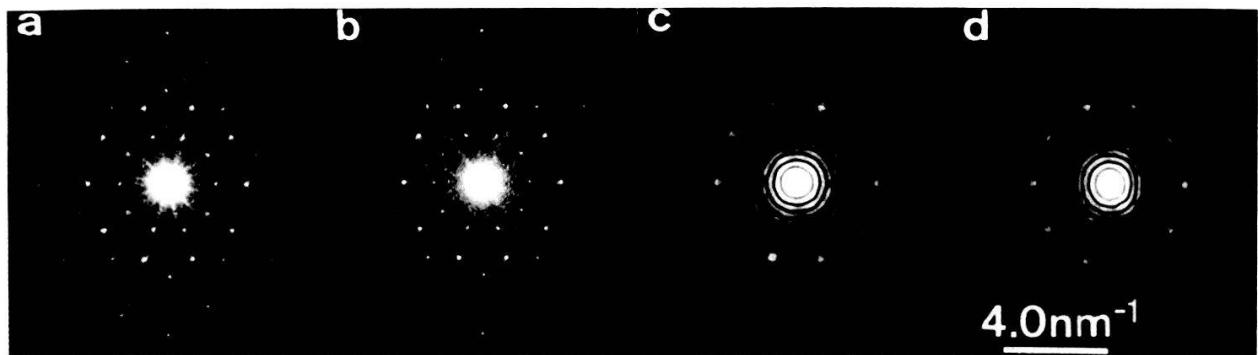


Figure 2 Optical diffraction patterns corresponding to the area of the structure image shown in Fig. 1. The probe radius of the illumination was 14 nm for (a), 4.2 nm for (b), and 1.4 nm for (c) and (d). Pattern shown in (d) was taken with the center of the illumination slightly shifted.

10-fold symmetric diffraction spots was found to depend on the local structure of the area illuminated by the laser beam. A model involving ordinary multiple twin domains with many unit cells domain size is therefore impossible for this structure.

Fig. 3(a) shows one structure image taken along the 2-fold axis. In this projection, the structure image also shows nonperiodicity. Most bright spots in the image are arranged along parallel lines (cf. Fig. 3(a), observing the micrograph at grazing angle along the white arrow). Normal to these parallel lines, two different intervals are observed, i.e. minor and major ones, in a nonperiodic array. The ratio of minor to major distances was estimated from the micrographs as 1.7 ± 0.2 , which is consistent with the Golden Section $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$. The minor distance occurs only single and the major one cannot occur more than twice in succession. The arrays thus obtained are reminiscent of a Fibonacci Series with the major and the minor distance as the first two members because they contain commonly a repeat unit from the sequence which

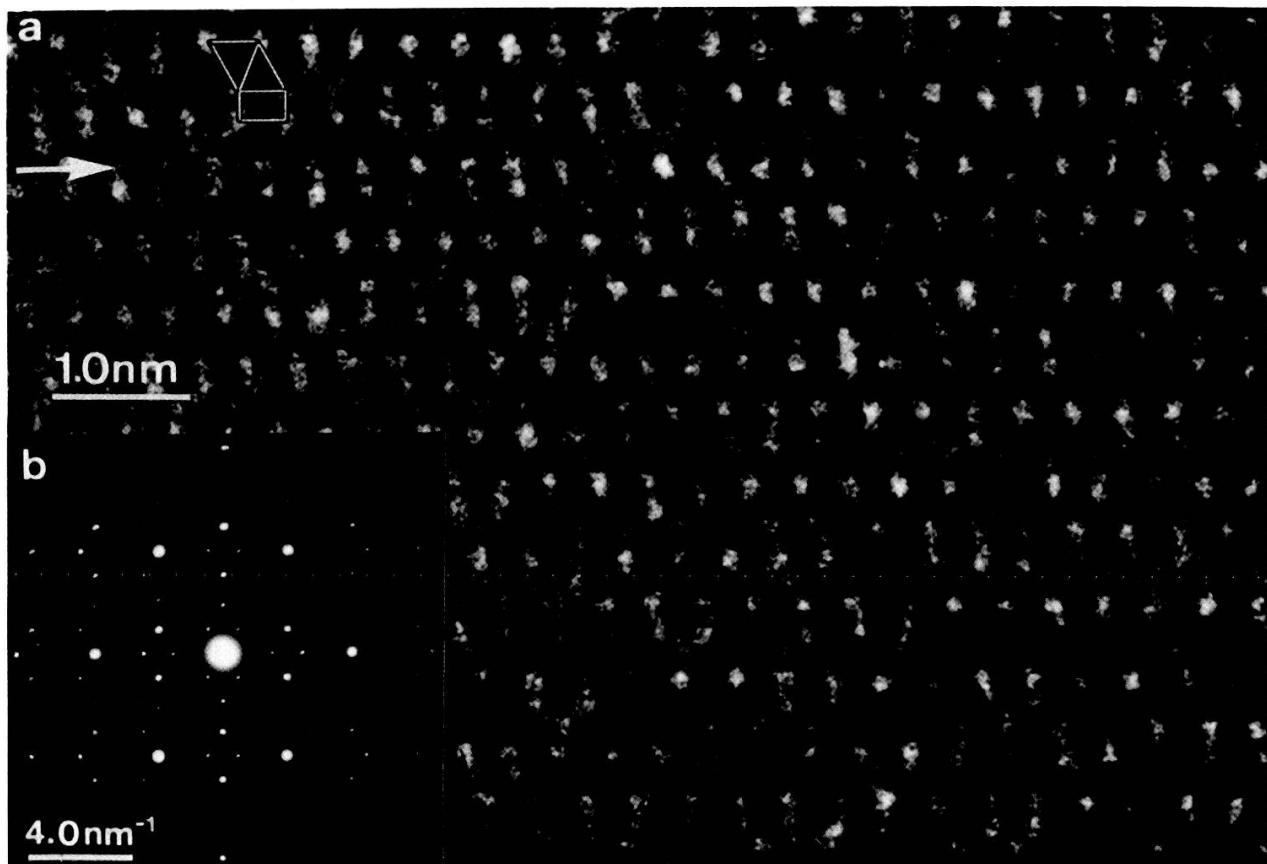


Figure 3(a) Structure image of Al-Mn crystalloid along one twofold symmetry axis. Planar tiling units are indicated in the upper left. Objective aperture radius 7.5 nm^{-1} . (b) Selected area diffraction pattern corresponding to (a).

corresponds to that Fibonacci series. In Fig. 3 the pattern of tiling units is schematically indicated. It consists of two isosceles triangles and one rectangle. Its height is related to the height of the triangles by τ . Frequent change of the stacking sequence in the direction of the white arrow is also observed (Fig. 3(a)).

The combined results of the high resolution structure images allow an interpretation in terms of a nonperiodic structure model using the same two rhombohedra as 3D-tiles as those used in the 3D-Penrose Rhombus Pattern [3] but allowing for small domains having periodic (i.e. parallel) arrangement of the tiling units. The extension of these domains, judging from the spot patterns in the image taken along the 2-fold axis, is limited to the size of approx. 10 rectangles or pairs of triangles (Fig. 3(a)).

The present case of a structural pattern exhibiting no translational periodicity and thus no Bravais lattice but sharp diffraction spots (consistent with long rang order of bond orientation resulting from tiling with two geometric tiling units) can be compared with a similar state of ordering found in small Ni-Cr particles [6].

We acknowledge fruitful discussions with M. Arita and R. Wessicken.

References

- [1] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias and J.W. Cahn, Phys. Rev. Lett. 53, 1951 (1984).
- [2] D. Levine and P.J. Steinhardt, Phys. Rev. Lett. 53, 2477 (1984).
- [3] M. Gardner, Scientific American 236, 110 (1977).
- [4] A.L. Mackay, Sov. Phys. Crystallogr. 26, 517 (1981).
- [5] P. Kramer and R. Neri, Acta Cryst. A40, 580 (1984).
- [6] T. Ishimasa, H.-U. Nissen and Y. Fukano, Workshop on Physics of Small Particles, Oct. 18-20, 1984, Gwatt, Switzerland.

RELAXATION DIPOLAIRE DANS $\text{KTaO}_3:\text{Na}$

M. Maglione*, Institut de Physique Expérimentale, EPFL
CH-1015 LAUSANNE, Switzerland

U.T. Höchli, IBM Zurich Research Laboratory, CH-8803 RUESCHLIKON,
Switzerland

Résumé : Nous avons mesuré la réponse diélectrique à hautes fréquences de cristaux mixtes $\text{KTaO}_3:\text{Na}$ après les avoir trempés à 77 K. Les données prises à cette température pendant 120 heures montrent que la réponse diélectrique change en fonction du temps. Des mesures de résonnance magnétique nucléaire effectuées dans les mêmes conditions montrent que le temps de relaxation spin-réseau du noyau Na change simultanément avec la constante diélectrique.

Le KTaO_3 pur est un perovskite hautement polarisable qui ne subit pas de transition de phase même à très basses températures. Les cristaux mixtes obtenus par substitution d'ions Na en site K ont fait l'objet de différentes études dans la dernière période [1]. En particulier, Yacoby et Just [2] ont montré que les ions Na occupent une position décentrée dans une des 6 directions $\langle 100 \rangle$ même à température ambiante. Par conséquent, des dipôles induits par la position décentrée des ions Na sont distribués dans le cristal hôte. Des mesures de résonnance magnétique nucléaire ont montré que le moment associé à chaque dipôle est de 0.04 Å·e [3]. Un pic dans la partie réelle de la susceptibilité ϵ_1 a été mesuré à des températures autour de 20 K pour des concentrations de Na supérieures à 12% [4]. Il a été interprété en termes de transition de phase à des températures dépendant de la concentration x de Na.

*Adresse pour correspondance : IBM Zurich Research Laboratory,
8803 RUESCHLIKON, Switzerland

Mais, de récentes mesures de RMN ont démontré que le maximum de ϵ_1 et la variation abrupte de la compliance élastique ne correspondent pas à un effet critique dans le temps de relaxation spin-réseau T_1 [1]. T_1 passe simplement d'un comportement de type relaxation ($T = 77$ K) à un comportement de type résonnance ($T = 4$ K) dans une gamme de fréquences autour de 20 MHz [3]. D'autre part, pour des fréquences jusqu'à 1 MHz, on trouve que ϵ_1 dépend linéairement de $\log \omega$ à 4 K et qu'il est indépendant de la fréquence à $T = 77$ K. La dépendance en fréquence de T_1 et de ϵ_1 est le signe d'une dynamique relaxationnelle qui s'instaure quand on refroidit le système dipolaire.

Des résultats similaires ont été obtenus dans le cas des verres de spins [5] et cette dynamique est une caractéristique commune à de nombreux systèmes désordonnés.

Un moyen de mettre en évidence cette dynamique est de tremper le système et de suivre l'évolution des réponses macroscopiques en fonction du temps après la trempe à T fixe.

Nous rapportons des données de ϵ_1 et de T_1 obtenues après des trempes identiques. Ces données rendront compte à la fois de l'interaction entre les dipôles et de l'interaction entre les dipôles et le réseau hôte. Pour comparer les résultats de $T_1(t)$ et de $\epsilon_1(t)$ autour de 20 MHz et pour élargir la gamme de fréquences disponibles nous avons utilisé un pont de mesure hautes fréquences HP4191A. Nous avons adapté ce pont par une ligne de transmission longue de 1 m qui permet la mesure dans l'environnement cryogénique.

Afin de réaliser une expérience à longue durée et pour faciliter la trempe, nous avons choisi $T = 77$ K et nous avons ensuite mesuré ϵ_1 pour quelques fréquences autour de 20 MHz pendant 120 h. Pour les fréquences autour de 20 MHz, nous avons détecté un pic dans ϵ_1 à $t = 20$ h environ pour une concentration de 8% de Na et rien de significatif pour les concentrations de 12% et de 16%.

C'est à cette fréquence le Larmor de 20 MHz que la relaxation spin-réseau devient non-exponentielle. Ce phénomène se produit

seulement pour $x = 5\%$ et également à 20 heures après la trempe [6].

Nous proposons donc un modèle pour expliquer à la fois la variation de la constante diélectrique $(\Delta\epsilon_1/\epsilon_1)_{\text{mes}} = 2.5\%$ et la non-exponentielle relaxation des Na en RMN.

Nous supposons que des volumes cohérents de s dipôles de Na, dit clusters, s'accroissent en fonction du temps (Fig. 1). La susceptibilité diélectrique macroscopique ϵ_1 est reliée à la distribution des clusters $g(s)$ et à la distribution des temps de relaxation $\tau(s)$ par

$$\epsilon_1 = \frac{\rho_0^2}{3 kT \epsilon_0} \int_1^{s_{\max}} s^2 \frac{g(s)}{1 + \omega^2 \tau^2(s)} ds$$

où ρ_0 est le moment d'un dipôle, ω la fréquence d'excitation et s_{\max} la taille maximale des clusters. Au fur et à mesure que les clusters s'accroissent, le temps de relaxation de chaque cluster évolue comme

$$\tau(s) = \tau_0 \exp \frac{s}{s_0}$$

où τ_0 est le temps de relaxation d'un seul dipôle. Pour $s < s_0 \log(\tau/\tau_0)$, ϵ_1 est proportionnel à s_{\max} alors que pour $s > s_0 \log(\tau/\tau_0)$, ϵ_1 décroît comme $1/s_{\max}^2$. Celà peut expliquer le pic de susceptibilité pour l'échantillon contenant 8% de Na pour lequel l'évolution commence avec $s_{\max} < s_0 \log(\tau/\tau_0)$. Pour les échantillons plus fortement dopés (12%, 16%), on a toujours $s_{\max} > s_0 \log(\tau/\tau_0)$ et on ne mesure donc pas de pic.

A partir des données expérimentales et en supposant que $g(s)$ est constant entre 1 et s_{\max} , on peut déduire que $s_0 \sim 300$ dipôles de Na.

La même description en termes de clusters peut être appliquée aux résultats de RMN. En effet, à l'aide du théorème de fluctuation-dissipation, le temps de relaxation spin-réseau est relié à la partie imaginaire de la susceptibilité diélectrique $\epsilon_2(\omega)$ et $\epsilon_2(2\omega)$ [7]. Les temps de relaxation T_1 sont donc distribués spatialement et on s'attend à une décroissance non-exponentielle

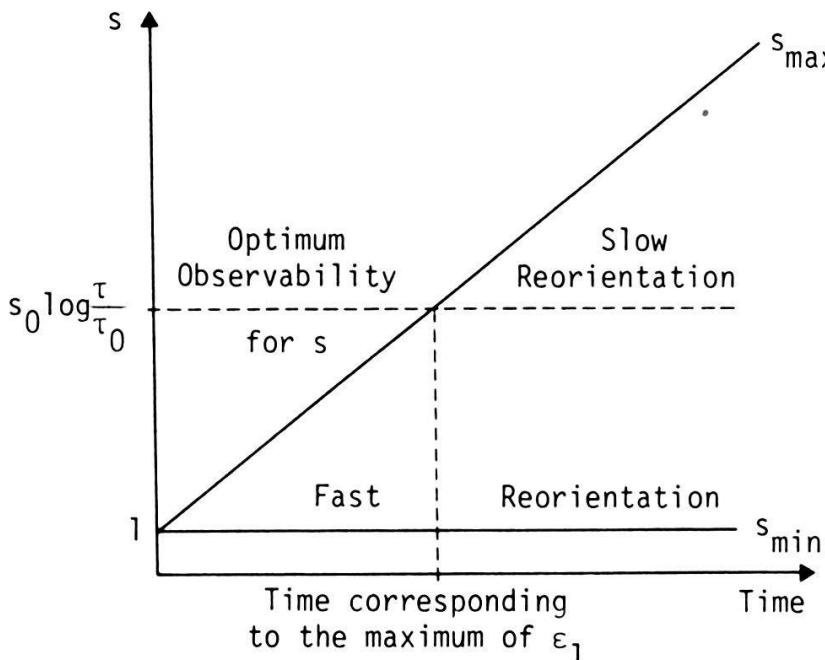


Fig. 1. Représentation schématique de l'évolution des clusters en fonction du temps.

de l'aimantation. Ceci est observé 20 heures après la trempe. Immédiatement après la trempe, on observe une relaxation exponentielle car les clusters cohérents sont séparés par une longueur inférieure à 200 Å et la diffusion des spins est assez rapide pour maintenir une température de spin moyenne.

Conclusion

Les résultats expérimentaux de RMN et de constante diélectrique ont été analysés en termes de clusters cohérents de quelques centaines d'atomes de Na, qui évoluent en fonction du temps. Ceci montre que le système est hors d'équilibre et que le désordre ne se situe pas à l'échelle des dipôles individuels.

Références

- [1] J.J. Van der Klink et D. Rytz, Phys. Rev. B 27, 4471 (1983).
- [2] Y. Yacoby et S. Just, Solid State Commun. 15, 715 (1974).
- [3] U.T. Höchli et A. Rigamonti, J. Phys. C: Solid State Phys. 16, 6321 (1983).
- [4] T.G. Davis, Phys. Rev. B 5, 2530 (1972).
- [5] J.A. Mydosh in: Disordered Systems and Localization, Vol. 149 de Lectures Notes in Physics, Berlin, Springer (1981) p. 87.
- [6] A. Rigamonti, S. Torre, U.T. Höchli et M. Maglione, à paraître.
- [7] A. Rigamonti, in Proceedings of the International School of Physics Enrico Fermi, Course LIX (1976), p. 271.

Der Einfluss der Substrat-Elektronenstruktur auf die CO Chemisorption

R. Hauert, P. Oelhafen, R. Schlögl, H.-J. Güntherodt

Institut für Physik der Universität Basel, Klingelbergstr.82, 4056 Basel

Die Elektronenstruktur von verschiedenen, sauberen und Kohlenmonoxid exponierten, amorphen Legierungen, wie Ni-Zr, Ni-B-Si, Pd-Si, Pd-U-Si, Ir-Si, und Fe-Zr, wurde mit UPS untersucht. Bei diesen amorphen Legierungen lässt sich in gewissen Bereichen die Legierungskonzentration, und damit auch die Elektronenstruktur, kontinuierlich variieren, ohne dass chemische oder strukturelle Heterogenitäten auftreten. Man erhält Information über die Substrat-Adsorbat Wechselwirkung und es kann erstmals direkt eine Korrelation der Bulk-Elektronenstruktur mit den CO Chemisorptions-Eigenschaften gezeigt werden.

Photoemissionsuntersuchungen an Aktinidengläsern: Co-(U-Th)-Legierungen

G. Indlekofer, P. Oelhafen, H.-J. Güntherodt

Institut für Physik der Universität Basel, Klingelbergstr.82, CH-4056 Basel

Das pseudobinäre metallische Glas $\text{Co}_x(\text{U}_y\text{Th}_{1-y})_{1-x}$ ($x \sim 50$; $25 < y < 100$) wurde mit UPS und XPS untersucht. Die Valenzkonfiguration des Urans ist dabei von besonderem Interesse. Im Gegensatz zum System (Pd-U)-Si¹ zeigt das Uran in diesen Gläsern auch bei starker Verdünnung keine Lokalisierung der 5f-Elektronen. Es liegt also wie in α -U in der 5f³ Konfiguration vor. Die Rumpfniveau-Spektren der Thorium 4f-Elektronen, insbesondere deren Shake-Up-Satelliten werden durch die Legierungspartner stark beeinflusst.

¹) G. Indlekofer, P. Oelhafen, and H.-J. Güntherodt: Proceedings of the 5th Int. Conf. on Rapidly Quenched Metals, Würzburg, 1984, im Druck.

A new ordering state between crystalline and amorphous in Ni-Cr

T. Ishimasa, H.-U. Nissen, Y. Fukano

Laboratorium für Festkörperphysik, ETH, CH-8093 Zürich

Electron microscopy of small Ni-Cr particles prepared by gas evaporation shows multiply-twinned σ -phase structure in an outer layer and a disordered structure in the interior interpreted as a nonperiodic tiling with cube- and triangular prism-shaped units whose corners appear as bright dots. Sharp spots in electron and optical diffractograms define a 12-fold symmetry element inconsistent with a Bravais Lattice. This new ordering state (Crystalloid state) has far-reaching orientational order but no translational symmetry. The orientational far order results from the arrangements of the two geometric units.

Kristalloides Al₆Mn: Eine Charakterisierung

R. Schlägl, P. Reimann, H. Bretscher, P. Oelhafen, R. Hauert, A. Tschumi,
 T. Zingg, E. Schüpfer, V. Geiser, H.-J. Güntherodt
 Institut für Physik der Universität Basel, Klingelbergstr.82, 4056 Basel

Durch rasches Abschrecken von aluminiumreichen Manganlegierungen wurde jüngst ein neuartiger Zustand fester Materie entdeckt (1). Wir haben Proben dieses Materials mit verschiedenen Abkühlraten hergestellt und mit Pulverröntgenographie, Differential-Scanning-Kalorimetrie, Photoelektronenspektroskopie und Rasterelektronenmikroskopie charakterisiert. Der elektrische Widerstand von ungeordneten und kristallisierten Proben wurde von 1.2K bis 750K untersucht. Das Material zeichnet sich bei allen Abkühlraten durch einen stark heterogenen Aufbau aus.

(1) D. Shechman, J. Blech, D. Gratias and J.W. Cahn, Phys. Rev. Letter 53, (1984) 1951.

Amorphe Metalle: Beobachtungen zur Mikroheterogenität

R. Schlägl, V. Geiser, H.-J. Güntherodt
 Institut für Physik der Universität Basel, Klingelbergstr.82, 4056 Basel
 A. Reller
 Institut für Anorg. Chemie der Universität Zürich, Winterthurerstr.195, Zürich

Bei der anodischen Oxidation von amorphem Fe₄₀Ni₄₀B₂₀ und Pd₈₁Si₁₉ in saurer Lösung wurde bei Stromdichten von ca. 0.1 mA/cm² ausgedehnte Lochfrasskorrosion beobachtet. Röntgenographisch blieben die Proben vollständig amorph. Bei der elektronenmikroskopischen Untersuchung der Lochränder wurden jedoch klar kristalline Bereiche in der amorphen Matrix beobachtet. Mögliche Ursachen und die Konsequenzen für die Charakterisierung der Heterogenität metallischer Gläser werden diskutiert.

Electronic Changes of State of Muonium Defects in Solids

Hp. Baumeler, H. Keller, R.F. Kiefl, W. Odermatt, B.D. Patterson and J.W. Schneider, University of Zurich; K.W. Blazey, IBM, Rüschlikon; T.L. Estle and S.L. Rudaz, Rice University, Houston, Texas (USA); J.P.F. Sellschop and M.C. Stemmet, University of the Witwatersrand (South Africa); C. Schwab, Pasteur University, Strasbourg (France)

Hydrogen-like muonium defects are formed when muons are implanted into insulators and semiconductors, and their hyperfine interaction and chemical lifetime may be determined with the muon spin rotation technique. Examples will be shown in group-IV semiconductors and cuprous- and alkali-halides. In several cases, thermally-induced electronic changes of state are observed on a microsecond time scale which alter the strength and/or symmetry of the hyperfine interaction. Models for these transitions will be discussed.

ANGEWANDTE PHYSIK UND ANDERE DOMÄENEN

ANDO I : Laser

PHOTOACOUSTIC DETECTION OF GASEOUS AIR POLLUTANTS WITH A CO LASER

S. Bernegger, P.L. Meyer and M.W. Sigrist, Physics Department, ETH,
Hoenggerberg, CH-8093 Zurich, Switzerland

Abstract: The characteristics of laser-photoacoustic spectroscopy for applications in air pollution monitoring are discussed. A CO laser-photoacoustic system is described. Calibration measurements with NO are compared with calculations based on the AFGL trace gas compilation yielding good agreement on the dominant NO lines. Furthermore the absorption spectrum of 1,3-butadiene at CO laser wavelengths is shown for the first time.

1. Introduction

Today, the monitoring of various air pollutants is of great interest for the understanding of the numerous chemical and physical processes occurring in the terrestrial atmosphere which finally result in the formation of smog, acid rain etc. Apart from more conventional methods lasers have also been applied for this type of studies. With respect to the sensitive detection of gases, resonance absorption measurements with tunable laser radiation play an important role. Among other schemes photoacoustic spectroscopy (PAS) with lasers has been demonstrated to be very useful due to its simple arrangement and room temperature operation, its high sensitivity, its wide dynamic range etc. [1,2].

2. Experimental Arrangement

A typical setup for laser-PAS of gases is shown in Fig. 1. The mechanically chopped radiation of a cw laser is directed into a cell which contains the gas mixture under study. If the wavelength is tuned to an absorption line of the gas, energy is absorbed and partly converted to thermal energy which is manifested as a pressure change in the cell. These pressure variations are detected with a microphone whose output is further amplified by a lock-in amplifier. Since under typical conditions the photoacoustic (PA) signal is proportional to the absorption coefficient and the incident laser power an absorption spectrum is obtained by recording the normalized PA sig-

nal vs wavelength. Gas studies are preferentially performed in the mid-IR wavelength range where most gases exhibit specific absorption features. In the wavelength range of a CO laser many important pollutants like nitric oxide (NO), peroxyacetyl nitrate ($\text{CH}_3\text{CO}_3\text{NO}_2$), formaldehyde (H_2CO), phosgene (COCl_2), ethylene (C_2H_4), 1,3-butadiene (C_4H_6), propylene (C_3H_6), ammonia (NH_3) etc. are absorbing.

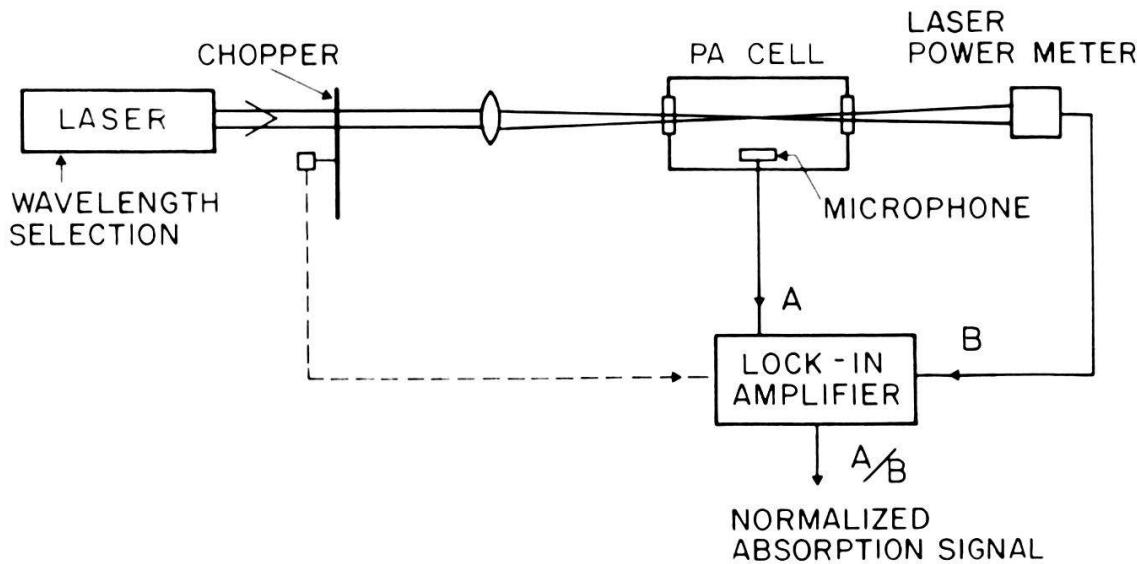


Fig. 1 Experimental setup for laser-photoacoustic spectroscopy of gases.

We used for our investigations a cw sealed-off $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ laser (Edinburgh Instruments, Type PL 3) which can be grating-tuned on ca. 75 transitions between $5.15 \mu\text{m}$ and $6.13 \mu\text{m}$ at an operation temperature of -10°C . Output powers are between 5 mW and 1.5 W. It has to be noted that under certain conditions two adjacent laser transitions can oscillate simultaneously [3] which may affect precise absorption measurements. Two types of PA cells both equipped with miniature electret microphones (Knowles BT 1751) have been tested for comparison: a cylindrical non-resonant type operated at a chopper frequency of 130 Hz and the resonant type described in another paper [4]. Both cells have similar responsivities. However the resonant cell yields a lower limit for the minimum detectable absorption coefficient due to its six times lower background signal.

3. Results and Discussion

Only few experimental absorption spectra of gases in the wavelength range of the CO laser exist in the literature. For NO some data have been published [5-7] as well as width- and line strength-calculations in the

5.3 μm NO fundamental band [8]. However, calibrations of our PA system based on these data are difficult mainly due to uncertainties in the proper assignments of CO laser transitions. Therefore we first performed new calculations on the basis of the AFGL trace gas compilation [9] by adding all contributions from absorption lines of a specific trace gas within a range $\Delta\nu$ of $\pm 60 \text{ cm}^{-1}$ near a CO laser transition. In the case of NO good agreement at the dominant NO absorption peaks has been obtained between a spectrum measured with a certified 100 ppm NO-N₂ mixture and our calculations. However it has been observed that the PA signal strongly depends on the precise grating- and piezoelement position at particular CO laser transitions which is due to simultaneous laser oscillation on two adjacent transitions that are absorbed differently by NO. A further difficulty which originates from water vapor absorption at wavelengths $> 5.5 \mu\text{m}$ arises when comparing measured and calculated NO spectra.

In addition, first measurements have been performed with a certified mixture of 100 ppm 1,3-butadiene (C₄H₆) in N₂. The measured spectrum is shown in Fig. 2.

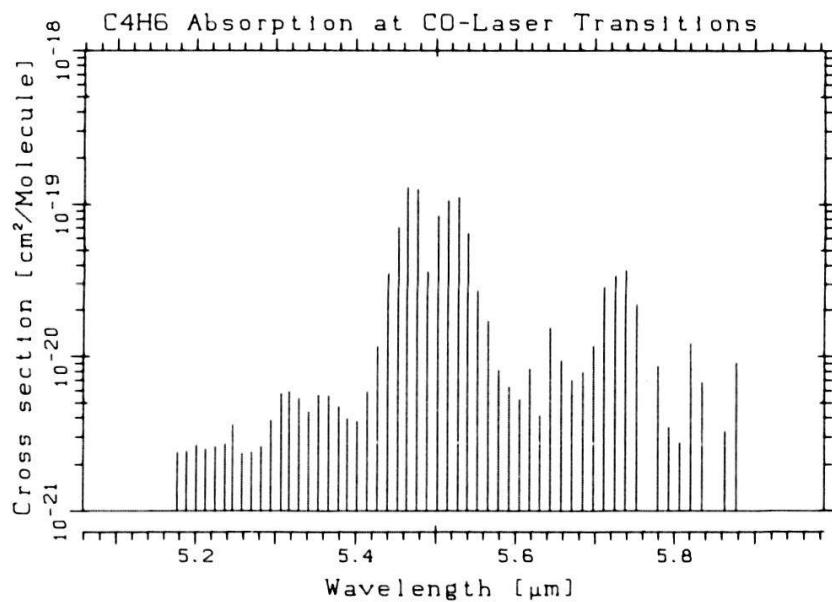


Fig. 2 PA absorption spectrum of 1,3-butadiene (C₄H₆) at CO laser transitions.

The calibration of the absorption cross section has been performed on the basis of the NO data. In contrast to NO or H₂O, the single rotational lines in C₄H₆ overlap and are not resolved in the absorption spectrum. Since simultaneously emitted CO laser transitions are close to each other they are almost equally absorbed by C₄H₆. The PA spectra are therefore very well reproducible. Further measurements as well as improvements on the sensitivity of our system with more sensitive microphones and better acoustic isolation are in progress. A more detailed report will be published elsewhere.

Acknowledgments

We should like to thank F. Kneubühl, ETH Zurich, for valuable discussions. This project is supported by the National Research Program NFP 14 "Lufthaushalt und Luftverschmutzung in der Schweiz" of the Swiss National Science Foundation.

References

- [1] C.K.N. Patel, *Science* 202, 157 (1978)
- [2] M.W. Sigrist and J. Hinderling, *Proc. Int. Conf. LASERS'83*, San Francisco (USA), ed. by R.C. Powell, STS Press 1985, pp. 115-121
- [3] R.B. Dennis, H.A. Mackenzie, G. McClelland and F.H. Hamza, *Optics and Laser Technology* 8, 221 (1976)
- [4] P.L. Meyer, S. Bernegger and M.W. Sigrist, *Helv. Phys. Acta*, this issue
- [5] R.T. Menzies, *Appl. Optics* 10, 1532 (1971)
- [6] B.K. Garside, E.A. Ballik, M. Elsherbiny and J. Shewchun, *Appl. Optics* 16, 398 (1977)
- [7] W. Schnell and G. Fischer, *Opt. Lett.* 2, 67 (1978)
- [8] L.L. Abels and J.H. Shaw, *J. Mol. Spectr.* 20, 11 (1966)
- [9] L.S. Rothman, S.A. Clough, R.A. McClatchey, L.G. Young, D.E. Snider and A. Goldman, "AFGL Trace Gas Compilation/AFGL Atmospheric Absorption Line Parameters Compilation", Air Force Geophysics Laboratory, Hanscom AFB, Bedford, Mass. (September 1982/October 1982)

PHOTOACOUSTIC DETECTION OF GASEOUS AIR POLLUTANTS WITH A CO₂ LASER

P.L. Meyer, S. Bernegger and M.W. Sigrist, Physics Department, ETH,
Hoenggerberg, CH-8093 Zurich, Switzerland

Abstract: A CO₂ laser-photoacoustic system is described which is used for monitoring gaseous air pollutants. Calibration measurements yield a background-limited minimum detectable absorption coefficient of < 10⁻⁷ cm⁻¹. A dynamic range of > 5 orders of magnitude is obtained for ethylene. Marked differences are observed in the absorption spectra of indoor air samples depending on their local origin.

1. Introduction

In a number of studies laser-photoacoustic spectroscopy (laser-PAS) has been demonstrated to be feasible for the sensitive detection of trace gases [1]. In this respect cw CO₂ lasers are of special interest due to their high power and their, although only stepwise, easy tunability between 9 and 11 μm. This wavelength range is part of the "fingerprint" region within which many gases exhibit specific absorption features [2]. A number of gases which are important for air pollution also absorb in the ¹²C ¹⁶O₂ laser wavelength range. These include ethylene (C₂H₄), 1,3-butadiene (C₄H₆), trichloroethylene (C₂HCl₃), perchloroethylene (C₂Cl₄), ozone (O₃), ammonia (NH₃), toluene (C₇H₈), benzene (C₆H₆) etc. This list can be extended considerably especially when considering also lasers that operate with other CO₂ isotopes. Some of the gases mentioned have indeed been detected with high sensitivity in certified mixtures, mostly together with nitrogen, with the aid of CO₂ laser-PAS. However, in real air samples where various pollutants are present simultaneously, problems may arise from interferences of the different absorption features. To our knowledge, no in-situ measurements on real air samples have been performed with CO₂ laser systems so far. Here we report on the setup of such a system and its characteristics as well as on the first measurements on indoor air samples.

2. Experimental Setup

The experimental setup is typical for photoacoustic studies in gases [3]. A cw sealed-off ^{12}C $^{16}\text{O}_2$ laser (Ultra Lasertech Type 8822) which can be tuned on ca. 70 transitions between $9.2\text{ }\mu\text{m}$ and $10.9\text{ }\mu\text{m}$ with output powers of up to 12 W is used as radiation source. The PAS cell is a modification of the resonant type introduced by Gerlach and Amer [4]. The cell is made of stainless steel and equipped with two Knowles miniature microphones. It has an acoustic resonance at 2660 Hz with a Q-factor of 270. The ZnSe Brewster windows and the gas connections are situated at nodes of the pressure distribution which minimizes the influence from window heating. Our cell can be used in the flow mode at flow rates $< 1\text{ l/min}$. This fact is very advantageous for the probing of environmental air.

3. Results and Discussion

Our spectrophone was first calibrated with the aid of a certified gas mixture of 100 ppm C_2H_4 in N_2 resulting in good agreement with literature data. The background signal was determined by operating the system with 99.999 % pure N_2 yielding $< 0.1\text{ }\mu\text{V/W}$ in the $10.4\text{ }\mu\text{m}$ CO_2 laser band and $< 0.5\text{ }\mu\text{V/W}$ in the $9.4\text{ }\mu\text{m}$ band. It follows a responsivity of $6.0 \pm 0.5\text{ Vcm/W}$ for the spectrophone. In conjunction with the low background this value yields a minimum detectable absorption coefficient of $< 10^{-7}\text{ cm}^{-1}$ for the $9.4\text{ }\mu\text{m}$ band and of $< 2 \cdot 10^{-8}\text{ cm}^{-1}$ for the $10.4\text{ }\mu\text{m}$ band corresponding to a C_2H_4 concentration in N_2 of $< 1\text{ ppb}$. These limits compare favourably with literature especially when taking into account that published data of minimum detectable concentrations are often determined on the basis of noise-limited instead of real background-limited values.

With regard to future measurements the dynamic range is of special interest. An example is shown in Fig. 1 where the PAS signal at the 10P(14) laser transition is plotted vs the C_2H_4 concentration in diluted $\text{C}_2\text{H}_4\text{-N}_2$ gas mixtures.

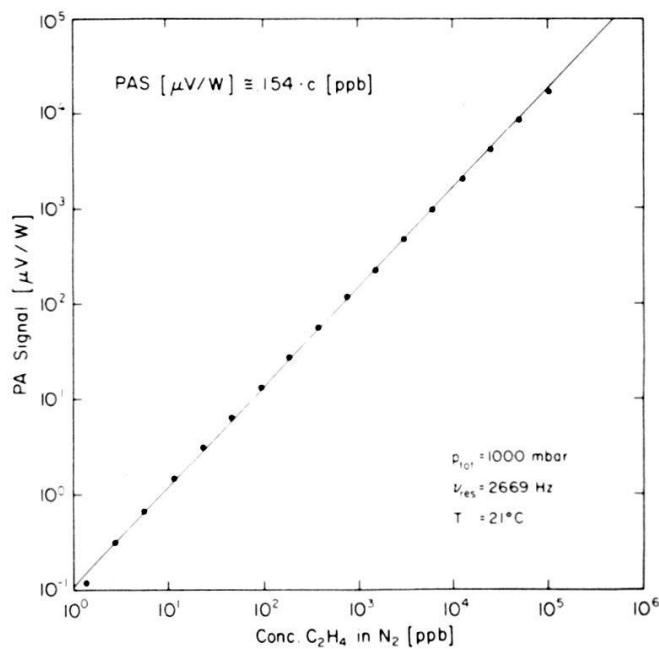


Fig. 1 Photoacoustic signal vs C_2H_4 concentration.

The PAS signal is seen to be proportional to the C_2H_4 concentration from 1 ppb to > 100 ppm, i.e. over 5 orders of magnitude. This result represents an extension of the dynamic range obtained e.g. by Eng [5]. It also demonstrates that PAS can be applied to both emission and immission studies.

1,3-butadiene (C_4H_6) which is like C_2H_4 one of the major constituents of car exhaust has also been studied for preparatory investigations. The measured PAS absorption spectrum is compared to literature in Fig. 2.

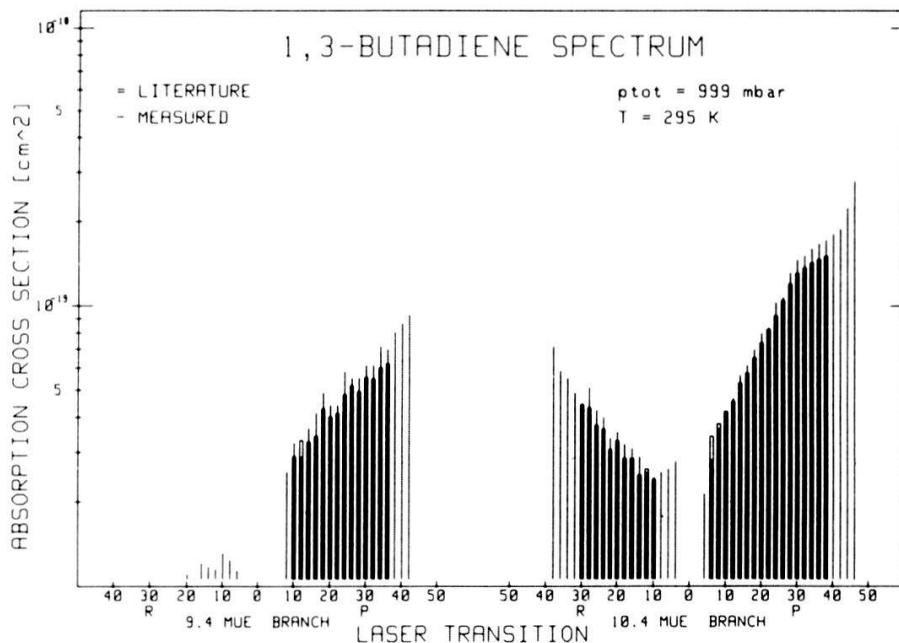


Fig. 2 Absorption spectrum of 1,3-butadiene.

Our measurements have been performed with a certified 100 ppm C₄H₆-N₂ mixture whereas the literature data by J. Boscher [6] are no PAS data but instead were obtained by long-path measurements. Good agreement is achieved except that our system permits studies on many more laser transitions as represented in Fig. 2 by the single solid absorption lines. Measurements on the 10P(46) laser transition result in a background-limited concentration of 1.3 ppb of C₄H₆ in pure N₂. However, this value can probably not be achieved in real air samples due to cross sensitivities with other atmospheric constituents. Absorption data of additional gases are needed to study this problem.

First measurements on indoor air samples look promising. Samples of room air and of garage air show marked differences in their absorption spectra. For example, a considerably higher C₂H₄ content of the garage air is obvious. A detailed analysis is in progress as well as the installment of our PAS system in a trailer for field measurements. A more detailed report will be published elsewhere.

Acknowledgements

We should like to thank F. Kneubühl, ETH Zurich, for valuable discussions. This project is supported by the National Research Program NFP 14 "Lufthaushalt und Luftverschmutzung in der Schweiz" of the Swiss National Science Foundation.

References

- [1] A. Rosencwaig
in "Photoacoustics and Photoacoustic Spectroscopy", Chemical Analysis, Vol. 57, J. Wiley & Sons, N.Y. (1980)
- [2] W. Schnell and G. Fischer, Appl. Optics 14, 2058 (1975)
- [3] S. Bernegger, P.L. Meyer and M.W. Sigrist, Helv. Phys. Acta, this issue
- [4] R. Gerlach and N.M. Amer, Appl. Phys. 23, 319 (1980)
- [5] R.S. Eng, Solid State Research (MIT Lincoln Laboratory) 4, 36 (1974)
- [6] J. Boscher, Report BF-R-63.616-4 (Battelle-Institut, Frankfurt (FRG), March 1979)

Phénomènes multimodes dans les lasers infrarouges lointains : compétition entre oscillation Raman, oscillation résonante et différentes transitions.

M.-A. Dupertuis, R.R. Salomaa* and M.R. Siegrist

Centre de Recherches en Physique des Plasmas, Association Euratom-Confédération Suisse, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, 21, av. des Bains - 1007 Lausanne / Switzerland

*Helsinki University of Technology, SF-02150 Espoo 15, Finland

L'oscillation Raman des lasers infrarouges lointains (FIR) est très utile pour beaucoup d'applications nécessitant une fréquence accordable. Une théorie semi-classique multimode a permis de jeter une nouvelle lumière sur les mécanismes favorisant l'oscillation Raman et de dégager certains cas exceptionnels où l'oscillation résonante est stimulée grâce à des processus multiphotons résultant de l'interaction entre différentes transitions.

Nichtlineare Effekte von UV-Pulsen eines N₂-Lasers in einer optischen Fiber

B. Valk, W. Hodel, M. Dätwyler, H.P. Weber

Institut für Angewandte Physik, Sidlerstr. 5, CH - 3012 Bern

Bei der Transmission von Licht in Glasfibern treten im ultravioletten Spektralbereich hohe Verluste auf. Dennoch ist es uns gelungen, in einem 60 cm langen Fiberstück mit einem core von 3.3 μm Durchmesser stimulierte Raman Streuung (SRS) und Selbst-Phasen-Modulation (SPM) bei Intensitäten von 10 GW/cm² zu messen. Die spektrale Breite der N₂-Laser Pulse wurde symmetrisch durch SPM verdoppelt und die 1. Stokes Linie konnte erzeugt werden. Die gemessenen statistischen Schwankungen des Raman Signals konnten mit einem Spiking in den N₂-Laser Pulsen im ps-Bereich erklärt werden, welches typisch für nicht modengekoppelte Laseremission ist.

Methode zur absoluten Zeitmessung der Röntgenemission von lasererzeugten Plasmen

W. Lampart, J. Balmer, E. Roschger, J. Hares*, J. Kilkenny*

Institut für angewandte Physik, Sidlerstr. 5, CH - 3012 Bern

Um die absolute Synchronisation einer optischen und einer Röntgen-Streakkamera zu gewährleisten, wurden die Ablenkplatten der beiden Röhren von einem gemeinsamen nsec-Pulsgenerator aus betrieben. Zur gegenseitigen Kalibration der beiden Kameras musste die Röntgenemission des Plasmas durch einen UV-Puls (4. Harmonische des Nd-Laserpulses) simuliert werden. Damit erlaubt diese Methode Messungen des zeitlichen Verlaufes der Röntgenemission von lasererzeugten Plasmen relativ zum Laserpuls mit einer Genauigkeit von ca. 20 psec.

* Dept. of Physics, Imperial College, London SW7 2BZ

Détection sélective de la pollution par LIDAR.

J.-P. Wolf, H. v.d. Bergh et L. Wöste.

Institut de physique expérimentale, EPFL, Lausanne.

Une station LIDAR (Light Detection And Ranging) mobile a été construite pour mesurer à distance les concentrations de NO_x , SO_2 , et O_3 . Le fonctionnement est basé sur le principe de l'absorption différentielle et utilise un laser excimer pompant 2 colorants. Les premières mesures sur le terrain sont prévues pour le mois de mars. La limite de détection est estimée à ~10 ppb, et ceci jusqu'à des distances de l'ordre de 3 km.

ANDO II : Energieforschung, Umweltschutz

DIE UEBERWACHUNG DER RADIOAKTIVITAET IN DER SCHWEIZ DURCH DIE KUER

H. Völkle, O. Huber, Eidg. Kommission zur Ueberwachung der Radioaktivität, c/o Physikinstitut der Universität, 1700 Fribourg

1. Einleitung

Die Eidg. Kommission zur Ueberwachung der Radioaktivität (KUER) wurde 1956 durch den Bundesrat gegründet, als Folge der Kernwaffenversuche der Grossmächte und des dadurch verursachten weltweiten Anstiegs der Radioaktivität der Umwelt. In den meisten Ländern wurden damals solche Ueberwachungsorganisationen aufgebaut, mit der Aufgabe, die Radioaktivität in der Umwelt, d.h. in der Luft, den Niederschlägen, dem Boden, den Pflanzen, Nahrungs- und Futtermitteln, Wasser (Oberflächen- und Grundwasser) etc. zu überwachen und im Hinblick auf die Strahlendosen der Bevölkerung zu beurteilen. In der Schweiz wurden damit Laboratorien und Institute des Bundes und der Hochschulen, die schon über Erfahrungen und die nötige Ausrüstung auf diesem oder verwandten Gebieten verfügten, beauftragt.

2. Ueberwachung und Methoden

Anfangs wurden in erster Linie Gesamt-Beta-Aktivitäten von Luftfiltern, Niederschlägen und Oberflächengewässern gemessen. Im Verlauf der Jahre wurden die Probenahme- und Messverfahren erheblich weiterentwickelt und verfeinert und zu nuklidspezifischen Messungen übergegangen. Nur so ist eine Beurteilung der Umweltradioaktivität hinsichtlich der Zusammensetzung und Herkunft als auch bezüglich der Auswirkung auf die Strahlendosen des Menschen möglich. Viele Nuklide können mittels der Gamma-Spektroskopie nachgewiesen werden. Hierzu wurden NaJ-Kristalle und später Ge(Li)-Detektoren, die ein wesentlich besseres Energieauflösungsvermögen besitzen, eingesetzt. Gewisse Nuklide lassen sich jedoch mit der Gamma-Messung nicht nachweisen und verlangen spezielle chemische Trenn- oder Nachweisverfahren, z.B. reine Alpha-Strahler (z.B. Pu-239), Sr-90, Tritium, Ar-37, C-14 oder auch Rn-222 (mit Folgeprodukten). Nebst der Untersuchung von in der Umwelt erhobenen Proben durch Analysen im Labor werden immer mehr "in-situ"-Messverfahren eingesetzt, die Radioaktivität und Strahlung direkt vor Ort messen: etwa die Ortsdosis (Thermolumineszensdosimeter, Hochdruckionisationskammern), Feldmessungen mit Ge-Detektoren oder die Messung von Radon und dessen Folgeprodukten im Hausinnern. Bei den

Probenahmeverfahren wurden neue Methoden angewandt, so bei der Messung von gasförmigem Jod und Edelgasen in der Luft oder Tritium in der Luftfeuchte. Die Verwendung von Computern ermöglicht eine automatische und rasche Auswertung der komplexen Gamma-Spektren, wie sie etwa bei Luftfiltern nach Atomversuchen in der Atmosphäre auftreten.

Während Anfangs die Ueberwachung des radioaktiven Ausfalles der Kernwaffenversuche im Vordergrund stand, wurden später mit der vermehrten Anwendung radioaktiver Isotope und der Kernenergie die Ueberwachung von Kernkraftwerken, Industrien und Spitäler immer wichtiger. Dies auch deshalb, weil seit dem nuklearen Teststop-Abkommen der Grossmächte im Jahre 1962 die künstliche Radioaktivität der Umwelt langsam abgenommen hat, und heute teilweise schon fast wieder Werte wie vor den Kernwaffenversuchen erreicht hat.

3. Mittel

Für ihre Ueberwachungsaufgaben stehen der Kommission teilweise eigene Laboratorien zur Verfügung, sie arbeitet aber auch eng mit spezialisierten Laboratorien des Bundes und der Hochschulen zusammen, sowie mit den Kontrollinstanzen (Bundesamt für Gesundheitswesen, Hauptabteilung für die Sicherheit der Kernanlagen, SUVA) und den Kantonschemikern.

4. Veröffentlichung der Ergebnisse

Bezuglich der von der KUER für die Radioaktivitätsüberwachung und die Umgebung von Kernkraftwerken, Industriebetrieben und Spitäler durchgeföhrten Probenahmen und Messung und der sich daraus ergebenden Schlussfolgerungen für die Strahlendosen der Bevölkerung sei auf die Jahresberichte zuhanden des Bundesrates und weitere Publikationen der Kommission verwiesen.

5. Neu aufgenommene Arbeiten

In den nachfolgenden drei Beiträgen werden Spezialgebiete vorgestellt, die nebst dem routinemässigen Untersuchungsprogramm gegenwärtig in Bearbeitung sind.

6. "In-situ"-Messungen um Kernkraftwerke mit Ge-Detektoren

Die Umgebungsüberwachung der Kernkraftwerke hat festzustellen, ob die Abgabegrenzen für Abluft und Abwasser eingehalten werden und ob Radioaktivität und

Strahlendosen in der Nahumgebung die Grenzwerte nicht übersteigen. Zur Messung von Ablagerungen radioaktiver Stoffe auf dem Boden wurden bis jetzt Proben von Erde und Gras erhoben und im Labor untersucht. Seit es tragbare Germanium-Gamma-Detektoren und netzunabhängige Vielkanalanalysatoren gibt, kann diese abgelagerte Radioaktivität rascher und einfacher direkt im Feld ohne den Umweg über Probenahme und Labormessung gemessen werden. Dies bedingt, dass die verwendeten Detektoren entsprechend kalibriert, und die Methode durch Labormessungen überprüft wird. So wird es möglich, Ablagerungen radioaktiver Stoffe in der Umgebung von Kernkraftwerken festzustellen, die weit unter den Werten liegen, die bei Ausschöpfung der Abgabelimiten über die Luft auftreten würden. Auch in einem Störfall hat diese Methode erhebliche Vorteile, da sie innerhalb weniger Stunden Angaben über eine eventuelle Kontamination des Bodens liefert. Aus dem so ermittelten Radioaktivitätsgehalt des Erdbodens, oder der Bodenoberfläche, kann mittels eines Modells die Gamma-Ortsdosisleistung im Freien, verursacht durch den Radioaktivitätsgehalt des Boden, berechnet werden. Hierzu ist noch die kosmische Strahlung und ein kleiner Beitrag durch die Radioaktivität in der Luft zu addieren um die gesamte Ortsdosisleistung zu erhalten. Im Vergleich mit der tatsächlich gemessenen Ortsdosisleistung ergeben sich recht gute Übereinstimmungen.

7. Automatisches Dosisfernmessnetz

Mit dem Fall einer Gefährdung durch erhöhte Radioaktivität befasst sich die "Eidg. Kommission für AC-Schutz" (KAC). Sie ist das leitende Organ einer Alarmorganisation für den Fall einer Gefährdung durch Radioaktivität (Atom-bombenexplosion, Kernkraftwerkunfall etc.) Sie muss in der Lage sein, Ausmass und Verlauf der Gefährdung im ganzen Lande zu verfolgen und die notwendigen Massnahmen zum Schutze der Bevölkerung vorzuschlagen. Hierzu benötigt sie u.a. eine ständig besetzte Alarmstelle bei der Schweizerischen Meteorologischen Anstalt in Zürich, die jederzeit Meldungen aus dem In- und Ausland entnehmen kann um im Ernstfall die Alarmorganisation aufzubieten, welche über alle notwendigen Mittel verfügt um einen wirksamen Schutz der Bevölkerung zu erreichen. Hierzu gehört u.a. auch eine umfangreiche Messorganisation.

Ein Glied dieser Messorganisation wird gegenwärtig automatisiert, in Zusammenarbeit mit der Schweizerischen Meteorologischen Anstalt, die vor kurzem ein automatisches Wetterbeobachtungsnetz aufgebaut hat. Dieses überwacht an

insgesamt 81 Stationen zahlreiche meteorologische Parameter automatisch und meldet diese alle 10 Minuten an einen zentralen Computer. Dieses Netz wird gegenwärtig an 51 Stationen durch Radioaktivitätsfühler ergänzt, sodass nun auch die Strahlendosen an diesen Stationen automatisch an den zentralen Computer übermittelt werden. Falls die Messwerte einen bestimmten Pegel übersteigen wird ein Alarm ausgelöst. Auf diese Weise verfügt die Ueberwachungszentrale dauernd über die aktuellen Dosiswerte in der ganzen Schweiz. Im Normalfall, d.h. wenn die Radioaktivität nicht erhöht ist, erlauben diese Sonden die Messung der natürlichen Untergrundstrahlung und Korrelationen mit verschiedenen meteorologischen Parametern.

8. Sanierung von Wohnhäusern mit erhöhtem Radonpegel

Ein Strahlenschutzproblem, das sich erst in letzter Zeit manifestierte, ist die Strahlendosis durch Radon und dessen Folgeprodukte im Hausinnern. Radon ist ein radioaktives Edelgas der natürlichen Uran-Radium-Zerfallsreihe; es entsteht überall wo Radium zerfällt, d.h. im Erdboden, Gestein, Baumaterialien etc. und tritt als Edelgas teilweise in die Luft aus. Es wandelt sich durch Alpha-Zerfall in eine Reihe weiterer radioaktiver Tochternuklide (Alpha- und Beta-Strahler) um, die sich an die Aerosole der Luft anlagern und so mit der Atemluft in die Lunge gelangen können. Dort können sie abgelagert werden und bestrahlen bei ihrem Zerfall das Lungengewebe.

Radon in den Wohnhäusern ist in den meisten Fällen natürlichen Ursprungs (aus dem Boden oder aus Baumaterialien). Es gibt jedoch in der Schweiz auch Fälle, wo das Radon in Wohnhäusern von radiumhaltigen Abfällen aus der Uhrenindustrie (Radium-Leuchtfarbe von Uhrenzifferblättern) kommt. Bis 1963 wurde in erste Linie Radium verwendet, seit dieser Zeit praktisch nur noch das weit weniger gefährliche Tritium. Damals gab es noch keine Strahlenschutzvorschriften, die die Beseitigung von festen oder flüssigen Abfällen regelte. Die Rückstände gelangen daher auf Abfalldeponien oder über das Abwasser in die Kanalisation. Aus dem Boden oder der Kanalisation gelangt nun heute das Radon in die Wohnräume und akkumuliert sich dort. Einige Häuser in denen, oder in deren Nachbarschaft früher mit Radium gearbeitet wurde, werden gegenwärtig in Zusammenarbeit mit andern Bundesstellen wegen des hohen Radonpegels im Hausinnern saniert.

SPECTROMETRIE GAMMA "IN SITU" AUTOUR DES CENTRALES NUCLEAIRES SUISSES

Ch. Murith, H. Völkle, O. Huber, Institut de Physique (CFSR) université
CH-1700 Fribourg

Abstract: Pour déterminer le contenu du sol en éléments radioactifs, resp. les dépôts de radionucléides sur le sol, l'analyse conventionnelle d'échantillons en laboratoire (laborieuse et coûteuse en temps) livre des résultats précis. la mesure directe "in Situ" à l'aide d'un détecteur portable offre l'avantage d'obtenir rapidement une moyenne sur $\approx 100 \text{ m}^2$ de l'activité spécifique des radionucléides présents dans l'environnement et permet d'en déterminer le débit de dose qui en résulte.

1. Introduction

Pour surveiller les centrales nucléaires nous avons effectué des mesures "in situ" à l'aide d'un détecteur Ge(HP). L'objectif de ces mesures est de déterminer rapidement l'activité spécifique des radionucléides présents dans le sol ou déposés à sa surface lors d'une contamination. A partir de ces activités il est alors possible de calculer le débit de dose (exposure rate) qu'elles occasionnent. La validité de cette méthode de mesure directe dans l'environnement a été testée par comparaison avec les techniques de mesure conventionnelles prescrites autour des installations nucléaires, à savoir d'une part la spectrométrie gamma en laboratoire effectuée sur des échantillons prélevés et d'autre part la mesure de débit de dose total opérée à l'aide d'une chambre d'ionisation.

2. Calibration du spectromètre gamma Ge(HP)

La calibration se base sur le procédé développé par Beck et al [1]. Le modèle mathématique de répartition de l'activité y joue un rôle important (fig. 1 et 2). Elle dépend aussi des caractéristiques du détecteur utilisé principalement de son efficacité absolue (fig. 3).

3. Discussion des résultats

La figure 4 présente un spectre typique des mesures "in situ". La corrélation entre ces mesures et celles effectuées en laboratoire est exposée graphiquement sous la rubrique "Comparison: Field-Laboratory measurements" pour les

différents radionucléides naturels contenus dans le sol (séries ^{238}U et ^{232}Th , ^{40}K), ainsi que pour le ^{137}Cs provenant de la retombée radioactive des essais nucléaires. La corrélation est généralement bonne. Pour plus de détail, l'intéressé trouvera dans la référence [2] une étude approfondie de l'impact des différents paramètres influençant les résultats et une discussion des cas critiques.

Comme nous l'avons mentionné auparavant le débit de dose est souvent utilisé pour contrôler la radioactivité dans l'environnement. Il comprend une composante terrestre, calculée à partir des activités mesurées "in situ", une composante inhérente à la présence de radon dans l'air, mesurée en chaque site, ainsi qu'une composante cosmique mesurée à l'aide d'une chambre d'ionisation en fonction de l'altitude lors d'un vol en ballon. L'essentiel de ces résultats est présenté graphiquement sous la rubrique "Exposure rate measurements". On remarquera que les mesures additionnelles de débit de dose opérées en bateau sur le lac de Neuchâtel permettent une bonne extrapolation de la composante cosmique au niveau du sol.

3. Conclusion

La connaissance de chaque composante qui contribue en un endroit au débit de dose total est spécialement importante autour des installations nucléaires, par ex. dans le cadre du constat radiologique, où il s'agit de caractériser le site et aussi pour déterminer l'impact à long terme des émissions radioactives, qu'il s'agit de distinguer du fond naturel et de ses fluctuations. Pour remplir une telle tâche la spectrométrie γ "in Situ" constitue une méthode particulièrement appropriée surtout lors d'une contamination en surface ou encore pour la mesure de gaz rares dans l'air. Cette technique de mesure permet de garantir une surveillance à laquelle une pollution inadmissible due aux effluents radioactifs produits par une centrale nucléaire ne passe pas inaperçue.

4. Références

- [1] H.L. Beck, J. DeCampo, C.V. Gogolak: "In Situ Ge(Li) and NaJ(Tl) Gamma-Ray Spectrometry"; HASL-Report 258, New York, 1972
- [2] Ch. Murith "Radioactivity measurements in the vicinity of Swiss nuclear power plants". Thèse 883, présentée à la faculté des Sciences de l'Université de Fribourg

Fig. 1 Computation of the fluence rate per unit activity:

Uniformly distributed activity $\alpha \rightarrow 0$
 Surface deposited activity $\alpha \rightarrow \infty$

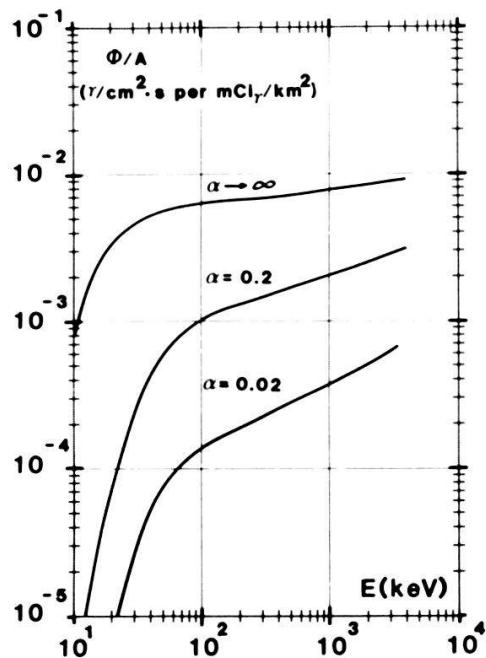


Fig. 3

Efficiency curve of the Ge(HP) detector

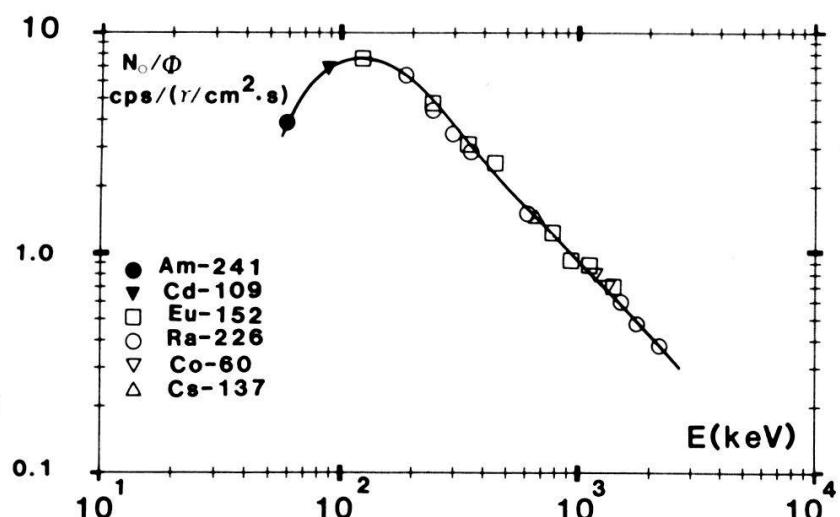


Fig. 2

Computation of the exposure rate per unit activity

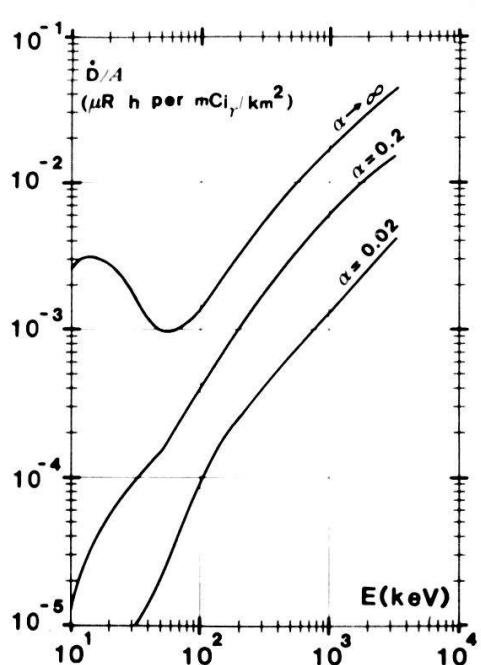
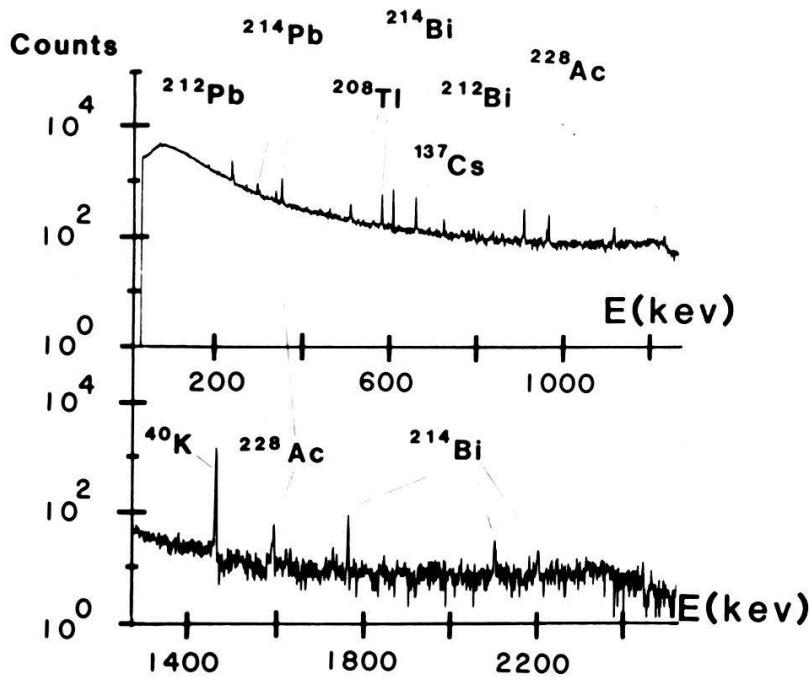
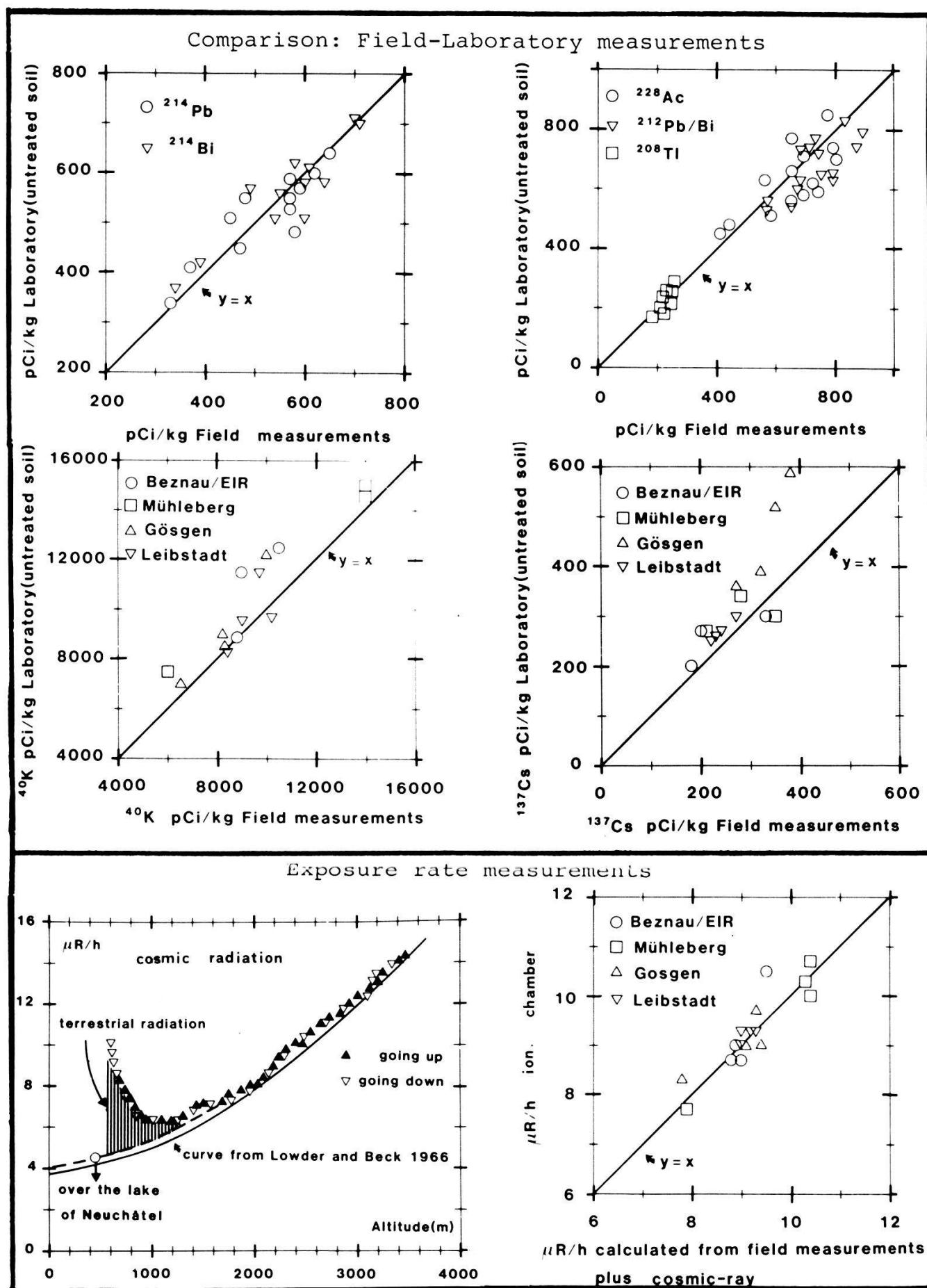


Fig. 4

Typical gamma sepctrum for "in situ" measurements





NADAM, le réseau suisse de surveillance automatique de l'irradiation ambiante: concept et premiers résultats

L. Ribordy, F. Wicht: CFSR, Inst. de Physique, 1700 Fribourg
P. Honegger, EDI/SUWZ, Postfach, 8044 Zürich

Actuellement en réalisation (12 stations en fonction), le NADAM comprendra finalement 51 capteurs de dose ambiante (à tube-compteur GM) reliés à des stations automatiques du réseau météorologique suisse de l'ISM. Les valeurs locales du débit de dose sont transmises avec les données météo toutes les 10 minutes à un ordinateur central. Celui-ci les contrôle, les linéarise (domaine $5\mu\text{R}/\text{h} \dots 5\text{R}/\text{h}$) et avertit la Centrale d'Alarme le cas échéant (seuil $0,1 \text{ mR}/\text{h}$). Les données accumulées depuis 2 1/2 ans permettent entre autre déjà d'intéressantes corrélations de la dose naturelle avec les phénomènes météorologiques.

Suche nach Radiumabfällen

B. Sturny, Phys. Inst. der Univ. Fribourg, Pérolles, 1700 Fribourg
H. Surbeck, KUER, Pérolles, 1700 Fribourg

Bis ca. 1964 wurde in der Schweiz radiumhaltige Leuchtfarbe verarbeitet. In den besten Jahren der Uhrenindustrie wurden einige Curie pro Jahr umgesetzt. Ein Teil des Radium-226 gelangte meist unabsichtlich in die Umwelt (Boden, Kanalisation). Diese Radiumabfälle stellen durch das austretende radioaktive Edelgas Radon-222 ein Gesundheitsrisiko dar, falls das Gas in Wohnräume eindringen kann. Es wird gezeigt, welche Messmethoden von der KUER eingesetzt werden, um diese Radiumabfälle zu finden.

Mesures à long terme sur des systèmes solaires : problèmes et fiabilité.

P. Ineichen et Groupe de Physique Appliquée du Prof. O Guisan
Section de Physique, Université de Genève, 1211 Genève 4

Dans le cadre de mesures d'ensoleillement ou de mesures sur des systèmes solaires, il est nécessaire d'acquisitionner plusieurs dizaines de paramètres pendant de longues périodes (plusieurs années) et de façon quasi-continue (pas de temps typique : six minutes). Nous présentons quelques exemples basés sur l'utilisation de microprocesseurs programmés en langage assembleur, exposant plus particulièrement les problèmes de stockage et du transport de l'information, la reconnaissance et le traitement des erreurs ainsi que les aspects de fiabilité à long terme, l'analyse des données étant effectuée de façon classique sur un gros ordinateur.

ANDO III : Plasmaphysik I

RADIATION IN THE TCA TOKAMAK WITH ALFVEN WAVE HEATING

B. Joye and S. Nowak⁺

Centre de Recherches en Physique des Plasmas, Association Euratom-Confédération Suisse, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, 21, Av. des Bains, CH-1007 Lausanne/Switzerland

⁺Physics Department, University of Fribourg/Switzerland

Abstract: The first Alfvén Wave Heating experiments were accompanied by a large radiation power loss due to impurities. A wide test of material optimization with respect to limiters and rf antennae was carried out to improve this behaviour. In this way clean plasma conditions were finally achieved.

1. Introduction

The TCA tokamak /1/ ($R = 0.61\text{ m}$, $a = 0.18\text{ m}$, $B_T \leq 1.51\text{ T}$, $I_p \leq 170\text{ kA}$, $n_e(0) = 10^{20}\text{ m}^{-3}$) has the objective to study Alfvén Wave Heating. First rf experiments were carried out in 1981 /2/ and the first heating results were obtained in 1982 /3/. These results showed a large increase of the radiated power loss during the rf pulse, indicating a serious impurity problem. An increase of low-Z impurity radiation was also observed. The dominant impurity was identified as iron which led to a radiation profile peaked on axis. Being made of stainless steel the vessel wall, the rf antennae and the limiters were consequently considered as possible impurity sources.

In order to reduce the radiation power loss a wide study of the materials and coatings used for the limiters and the antennae was carried out. In addition, the effect of lateral screens installed on both sides of the antennae was studied.

2. Experimental results

The present results were obtained under similar plasma conditions, namely $B_T = 1.51\text{ T}$, $q_a = 3.0 - 4.2$, D_2 as the filling gas, $(N, M) = (2, 1)$ antenna excitation, $P_{rf} = 80 - 120\text{ kW}$. Radiation analysis was performed using a scannable germanium bolometer /4/ and a normal incidence VUV-spectrometer. By these means, total radiation could be detected between a few and 2000 \AA ,

line emission by impurities between 250 Å and 2800 Å.

The original stainless steel bar limiters led to a radiation profile peaked on axis already during the ohmic heating phase, the central radiation accounting for about 40 % of the central ohmic heating power. With the onset of 80 kW of rf power the central radiation roughly tripled whereas the total radiation reached about the total ohmic input power.

Changing to a first set of wide carbon limiters resulted in a large reduction of both central and total radiation levels. The radial radiation profile remained nevertheless slightly peaked on axis even during the ohmic phase, very likely due to a contamination of the carbon limiters.

The next step consisted in installing wide stainless steel limiters. With this set, radiation became much worse during both ohmic and rf phases leading to the worst conditions observed in TCA.

TiC coated carbon limiters were then installed leading to a further improvement to the impurity radiation compared with the earlier mentioned carbon limiters. The fact that, during the rf pulse, the radiation profile again became highly peaked could partly be explained by the observed Ti-lines. In spite of this, iron was still observed indicating an impurity origin other than the limiters.

Narrow clean carbon limiters replaced the TiC coated limiters. The radiation loss was then the lowest observed /5/: The radial profile was flat during the ohmic phase with the central radiated power less than 10 % of the central ohmic power. These limiters were left in the machine for more than a year.

Meanwhile the original stainless steel plate antennae were replaced by new TiN coated bar antennae reducing the surface exposed to the plasma considerably without changing the excited spectrum. The radiation profile again improved becoming slightly hollow in the ohmic heating phase.

To reduce further the production of impurities lateral screens were installed on both sides of the antennae. This led to a reduction of the radiated power loss, the profile being clearly hollow throughout the whole plasma duration. A slight increase of the central radiated power still remained during rf. A disadvantage of the lateral screens was the decrease of the antenna loading resulting in a lower limit to the maximum delivered rf power.

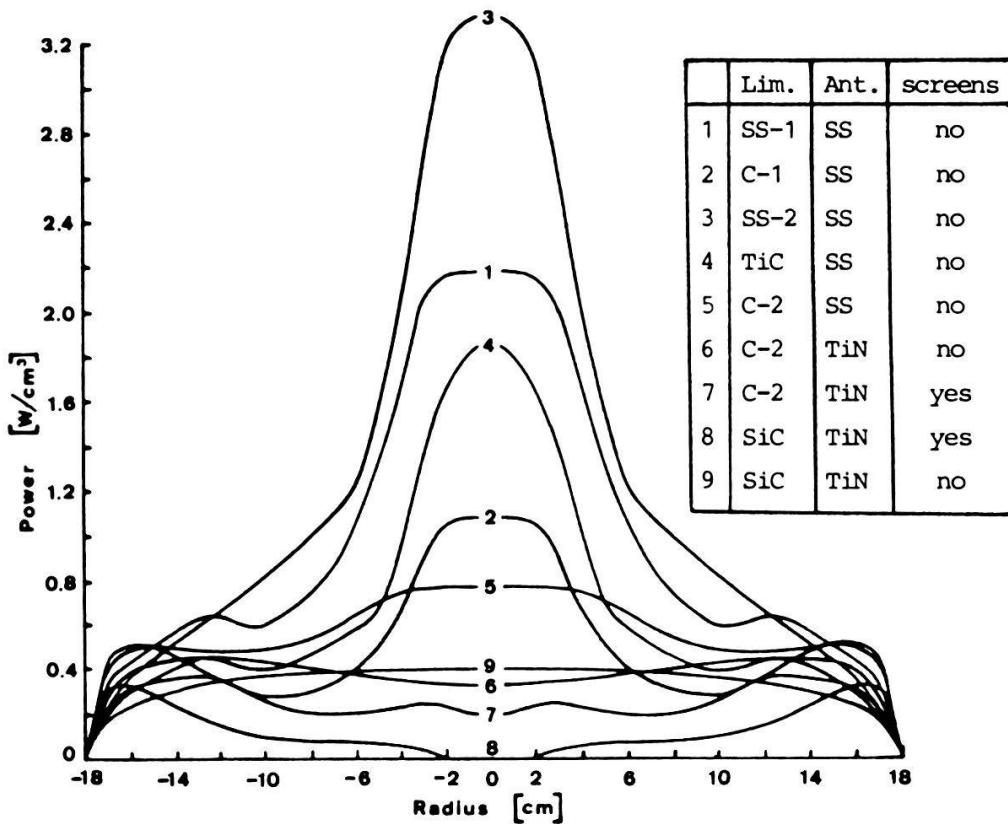


Fig. 1: Radiation profile during rf under different limiter and antenna conditions

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
I_p [kA]	100	90	98	100	125	133	130	130	133
q_a	4.1	4.2	4.1	4.1	3.3	3.0	3.1	3.1	3.0
P_{oh} [kW]	244	209	280	167	220	202	212	156	152
$\int P_{rad}(0)$ [W/cm³]	0.73	0.45	1.71	0.30	0.17	0.03	0.10	<0.01	0.04
$\int P_{rad}$ [kW]	141	104	186	74	78	52	69	35	24
$\int P_{rad}/P_{oh}$	0.58	0.50	0.66	0.44	0.35	0.26	0.33	0.22	0.16
P_{oh} [kW]	275	213	310	210	317	246	208	152	192
P_{rf} [kW]	80	80	80	80	103	113	115	114	117
$\int P_{rad}(0)$ [W/cm³]	2.65	1.04	3.58	1.90	0.69	0.36	0.20	<0.01	0.39
$\int P_{rad}$ [kW]	256	180	290	182	189	146	131	66	132
$\int P_{rad}/P_{oh}$	0.93	0.85	0.94	0.87	0.60	0.59	0.63	0.43	0.69

Table I: Parameter variation due to limiter and antenna modifications

The last modification to the limiters consisted in installing SiC coated carbon limiters. The radiated power loss reached the lowest level ever observed on TCA. Since the radiated power profile is now strongly hollow throughout the whole pulse a clean plasma, as far as high-Z impurities are concerned, has finally been achieved. Central radiation was even negligible during the rf pulse.

In a last step the lateral screens were again removed to achieve higher maximum delivered rf power. Consequently radiation again increased becoming slightly peaked during the rf pulse.

The variations of the discussed parameters are summarized in Table I.

3. Conclusion

A wide test of limiter and antenna material and coating allowed a continuous improvement to the radiation power loss observed during Alfvén Wave Heating in the TCA tokamak. It has thus been proved that careful design in the materials used in a tokamak experiment dedicated to the Alfvén Wave Heating scheme can lead to very clean plasma conditions. The question which arises is how to maintain high antenna loading and cleanest plasma conditions simultaneously.

Acknowledgements

The authors would like to thank the whole TCA team for their contributions to this work, which was partly financed by the Swiss National Science Foundation.

References

- [1] A.D. Cheetham et al., Proc. 11th Symp. Fusion Techn. (1980), Oxford, Pergamon Press 1981, vol. 1, p. 601
- [2] A. de Chambrier et al., Plasma Physics 24 (1982) 893
- [3] A. de Chambrier et al., Plasma Physics 25 (1983) 1021
- [4] H. Jaeckel et al., Proc. DPG, München, 1978
- [5] R. Behn et al., Plasma Physics and Controlled Fusion 26 (1984) 173

MAGNETIC ACTIVITY IN JET DISCHARGES DURING INTERNAL DISRUPTIONS

P.-A. Duperrex, R. Keller*, A. Pochelon*, G. Tonetti

JET Joint Undertaking, Culham Laboratory, Abingdon OX14 3EA, UK

*Permanent address : CRPP-EPFL, Euratom-Switzerland Association
21, av. des Bains, CH - 1007 Lausanne

Abstract : Two new types of magnetic activity have been measured by the internal discrete coils on a very fast time scale during the thermal relaxation produced by the internal disruption. They indicate a propagation at a wave speed, in addition to the usual thermal diffusion pulse.

Introduction : JET (Joint European Torus) is at present the largest magnetic confinement toroidal device. In the ohmic heating phase (1984), discharges with 3.8 MA, a current flat-top of 10 sec and energy confinement times of 0.8 sec have already been reached. The toroidal field is 3.45 T, major radius $R=2.96$ m, minor radius $a=1.25$ m, and discharge elongation $b/a < 1.6$.

JET is equipped with 128 magnetic coils distributed in 8 equidistant poloidal planes which form the 8 octants of JET, with 18 coils in each octant. This permits both toroidal and poloidal mode determination. These coils measure the magnetic field component parallel to the vacuum vessel wall (principally oriented in the b_θ direction). These coils are protected by a 2,5 mm thick inconel 600 tube which integrates b_θ above 10 kHz. The signal is therefore proportional to b_θ below 10 kHz, whereas above 10 kHz it is proportional to the magnetic field b_θ .

The other diagnostics used are electron cyclotron emission (ECE) in the Fabry-Perot mode, providing the electron temperature evolution on axis; the 2 mm-interferometer, which provides a line-integrated density through a vertical central chord; various soft X-ray diodes, looking horizontally and tangentially through a central chord; and the H_α light emission from the limiter.

Fast magnetic activity : The first type of magnetic activity takes the form of a fast magnetic pulse, lasting typically one millisecond and having a toroidal mode number $n=1$ and a $2 \leq m \leq 5$ evolutive mode structure. This mode has been called the gong-mode, both due to its apparently global nature and

to the wave character which it exhibits. There is effectively no measurable delay between the start of the internal disruption, as measured by the ECE electron temperature on axis and the strong magnetic pulse b_θ measured at the edge, as shown in Fig. 1.

The pulse occurs first predominantly at the outside equatorial position, then progressively "invades" the other poloidal angles. This oscillation has no connection with the usual island-type Mirnov activity, which is left unaffected to first appearance. The helicity of the deformation is found to be the same as that of the field lines.

The mode structure obviously strongly "remembers" the $n=1$, $m=1$ helical structure of the $q=1$ surface located close to the core and from where the motion originates, with the subsequent evolution to high m numbers resulting from mode coupling due to toroidal and non-circular shape effects.

The very fast transmission from the core to the edge indicates a wave phenomenon. Candidates to explain this wave activity may be found among low frequency MHD-waves, for example low frequency kinks, "zero-frequency" Alfvén waves and cusp waves, where coupling between these waves may also play a role.

Magnetic broadband activity : The level of magnetic broadband turbulence has been shown to be strongly related to electron confinement time both in ohmic discharges [1] and in neutral beam-injected discharges [2,3].

The magnetic broadband activity of JET has been measured, through an isolation transformer, by a quasi-equatorial discrete coil located behind the limiters. The b_θ spectrum, measured between 10 and 60 kHz shows a $f^{-2 \pm 0.5}$ dependence, with typical levels of a few 10^{-8} Tesla Hz $^{-1/2}$ at 10 kHz.

In order to determine whether a relation between magnetic broadband activity and confinement also exists in JET, we have been led to follow in detail the fast magnetic events occurring at the time of the internal disruption. These events are known to modulate periodically the confinement properties, predominantly in the core of the discharge.

After each internal disruption, the magnetic broadband activity (at 15 kHz) exhibits a periodic enhancement of more than a factor 3 in low q discharges, with a sharp rise less than half a millisecond after the internal disruption (Fig. 2). This increased activity is measured at the edge at a time before the heat pulse has reached the edge, as measured by

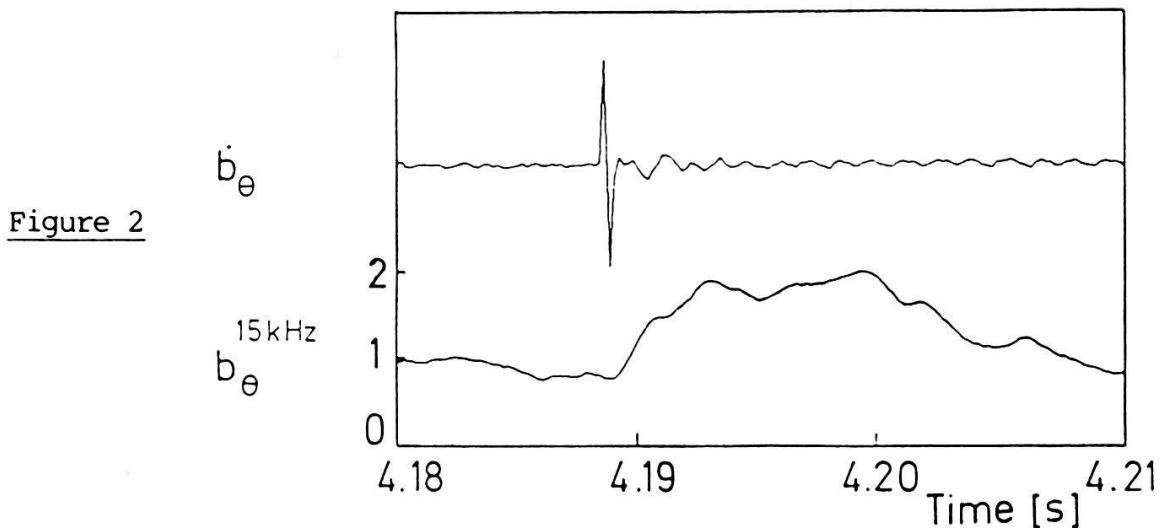
the periodic H_α -light enhancements. We therefore conclude that confinement and magnetic broadband activity are oppositely related, and on time scales that seem to reveal a faster than a diffusive propagation.

Conclusions : We have measured magnetic activity at the edge of the discharge related to the very central $q=1$ internal disruption activity. The time scale indicates in both the described activities a wave rather than a solely diffusive propagation. Furthermore, an abrupt increase in magnetic broadband turbulence measured at the edge is related to the internal relaxation (decrease) of confinement.

Acknowledgement : It is a pleasure to acknowledge here stimulating discussions with Professor F. Troyon. Dr. L.C. de Kock is gratefully acknowledged for his help in making the measurements possible, as well as Mr. A.L. Stevens and Dr. D. Campbell. Thanks are due to Dr. M.L. Sawley for reading the manuscript.

References :

- [1] P.A. Duperrex et al., Magnetic Broadband Turbulence Measurements and Ohmic Confinement in the TCA Tokamak, *Phys. Letters* 106A, 133 (1984)
- [2] B.A. Carreras et al., Transport Effects Induced by Resistive Ballooning Modes and Comparison with ISX-B Tokamak Confinement, *Phys. Rev. Lett.* 50, 503 (1983)
- [3] E.J. Strait et al., MHD Stability of High-Beta Plasmas in Doublet III, Proc. 11th EPS Conf. on Controlled Fusion and Plasma Physics, Aachen, Vol. I (1983), Paper A09



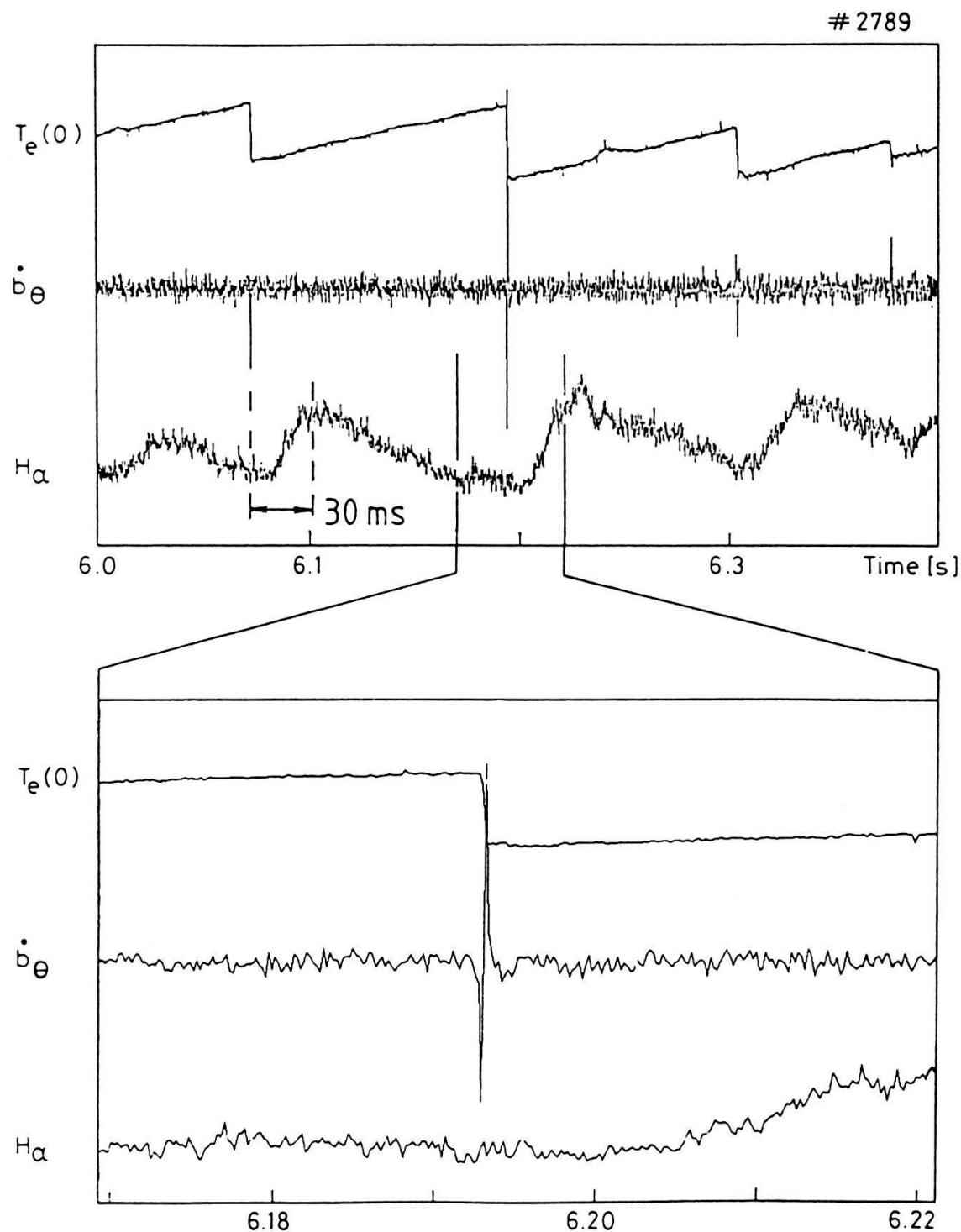


Fig. 1 : The "Gong-mode" exhibited by the b_θ signal at the time of the internal disruption, shown together with the central electron temperature (ECE) and the limiter H_α -light.

Fig. 2 : (previous page) The pulse of magnetic broadband activity at the time of the internal disruption, the time of which is indicated by the occurrence of the "Gong-mode".

Mise en évidence de l'augmentation de l'énergie des ions en cas d'injection d'impuretés légères.

A. de Chambrier, B. Joye et J.B. Lister

Les expériences de chauffage du tokamak TCA ont montré des élévations de température des ions (T_i)/1/, généralement associés à des variations de densité. Des variations équivalentes de densité par injection de gaz propre ne donnent pas les mêmes variations de T_i . Des injections d'impuretés légères donnent dans certains cas de très grandes augmentations de T_i . Une comparaison entre les expériences de chauffage, celles d'injections d'impureté et les prévisions théoriques pour ces dernières conduit à séparer les effets et montre l'importance des impuretés.

/1/ A. de Chambrier et al., IAEA Londres 1984 (CN-44-F-III-3)

The measurement of plasma electron temperature by means of the absorber foil technique in TCA

A. Pochelon and W. Simm

Centre de Recherches en Physique des Plasmas, Association Euratom-Confédération Suisse, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, 21, av. des Bains - 1007 Lausanne / Switzerland

Electron temperature profile measurements of hot plasmas can be performed using the soft X-ray absorber foil method. Assuming a Maxwellian plasma, T_e is deduced from the ratio of the fluxes measured by a pair of surface barrier diodes through two beryllium foils of different thicknesses. Although this method has a very good time resolution, it is extremely sensitive to impurities. This problem, as well as the trials to get rid of it are illustrated for the case of the Silicon impurities present in the TCA tokamak plasma.

The phase contrast technique as an imaging diagnostic for plasma density fluctuations.

H. Weisen

Centre de Recherches en Physique des Plasmas, Association Euratom-Confédération Suisse, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, 21, av. des Bains - 1007 Lausanne / Switzerland

This technique offers an attractive alternative to small angle Thomson scattering, from which it differs by providing spatially rather than wavenumber resolved information. It converts small relative phase shifts of a CO₂ laser probe beam due to refractive fluctuations into detectable intensity variations. Test results of a device built for the TCA tokamak will be presented.

Le bilan d'énergie de TCA : analyse et simulation.

J.-M. Moret, V. Gerweck et J.B. Lister

Centre de Recherches en Physique des Plasmas, Association Euratom-Confédération Suisse, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, 21, av. des Bains - 1007 Lausanne / Switzerland

Le bilan d'énergie de TCA permet d'étudier le confinement de l'énergie et l'efficacité du chauffage d'Alfvén. En régime ohmique, la conduction thermique P_{TCE} domine le bilan des électrons et la conductibilité $n \times e$ dépend peu de la densité. Pendant le chauffage RF, sous l'hypothèse que $n \times e$ et la forme du profil de température électronique T_e restent inchangées, l'augmentation de P_{TCE} associée à celle de T_e correspond à la puissance RF, traduisant une efficacité proche de un. Une simulation du chauffage tenant compte de sa structure en couches montre les effets néfastes des couches situées vers le bord.

ANDO IV : Halbleiter, dünne Schichten, Mikroelektronik

CONTACTLESS DETERMINATION OF THE BEHAVIOUR OF CHARGE CARRIERS
IN SEMICONDUCTING FILMS

W. Baumgartner and O. Oehler, Institut für Angewandte Physik, ETH-Hönggerberg,
CH-8093 ZUERICH, Switzerland

Abstract: A purely capacitive method allows the contactless determinations of the behaviour of charge carriers in semiconducting films. CdSe films were investigated.

1. Introduction

Usually information relating to charge carriers in semiconducting films is obtained from samples with metallic contacts. Contact barriers will modify considerably the electric field and therefore influence the transfer of charge carriers in the sample film.

In the arrangement as described the application of the driving electrical field is provided by a purely capacitive coupling.

2. Experimental

The experimental layout is described in Fig. 1. Two electrode layers P'_1 , P'_2 (Au, Cr, SnO_2) are applied to a quartz substrate Q. They adjoin a slit s (width 1 mm, length 8 mm).

Except for a small contacting section these electrodes are covered by an insulating film I' (SiO_2 , MgF_2 etc.; thickness $\sim 1 \mu\text{m}$). On its top there is the semiconducting sample SF. SF does not contact P'_1 , P'_2 . Three planar electrodes P_1 , P_2 , P_M are arranged parallel to SF at a distance of some 20 to 200 μm . The interspace may be filled out by a Mylar foil. The measuring electrode P_M faces exactly the slit s and is connected to a common

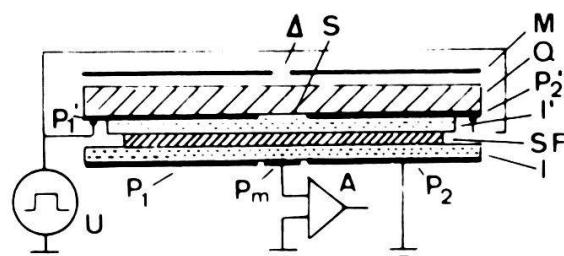


Fig.1 Layout of the device for contactless measurements at a semiconducting film (for denotation see text)

charge amplifier A [1]. P_1' and P_2' are grounded and represent shielding electrodes.

If a potential U_O is applied to P_1' , P_2' an electric field is initially established as described in Fig. 2. Accordingly, a locally variable potential $U(x,t)$ and hence an electrical field $E(x,t)$ exists along the coordinate x of the semiconducting film SF.

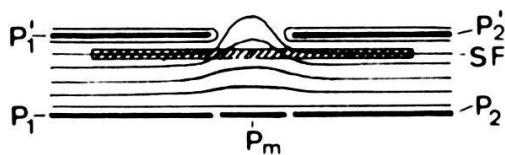


Fig.2 Display of equipotentials immediately after applying a potential $U_O > 0$ to P_1' , P_2' .

For $U_O > 0$ the field $E(x,t)$ moves positive holes present in SF in direction of the center of the slit s , whereas the negative electrons congregate symmetrically to the left and to the right of s . After a complete separation the displacement of the carriers comes to an end despite a residual amount of the field $E(x,t)$ still exists in the film SF. Only if additional carriers are provided in SF by (thermal, optical etc.) excitation $E(x,t)$ will decrease to zero with a rate related to their production rate. The positive charge accumulated in the central zone of SF (adjoining the slit s) induces an output signal $Q(t)$ at the charge amplifier by the negative charge influenced on the electrode P_M . In addition a charge Q_O due to the stray capacities $P_1' - P_M$ and $P_2' - P_M$ appears at P_M .

The time evolution of $-|q| \cdot U(x,t)$ ($-|q|$: charge of electron) after applying a positive voltage U_O is given in Fig. 3.

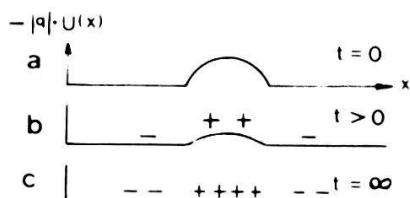


Fig.3 $-|q|U(x)$ as a function of the film coordinate x .
(++) and (--) denote positive and negative charges.

For the experiments CdSe films (thickness $\sim 0.2 \mu\text{m}$) have been used. Their preparation is based on chemical deposition. It followed essentially a schedule as reported by Pratt et al. [2].

The optical excitation of the carriers were achieved by irradiating the central strip (width $\Delta = 0.1 \text{ mm}$) of the slit s with the unfiltered light of a tungsten lamp.

3. Results

Fig. 4 depicts typical experimental results. A simple analysis yields for the increase of the concentration $p(t)$ of positive carriers

$(E_o > 0)$ in the illuminated strip:

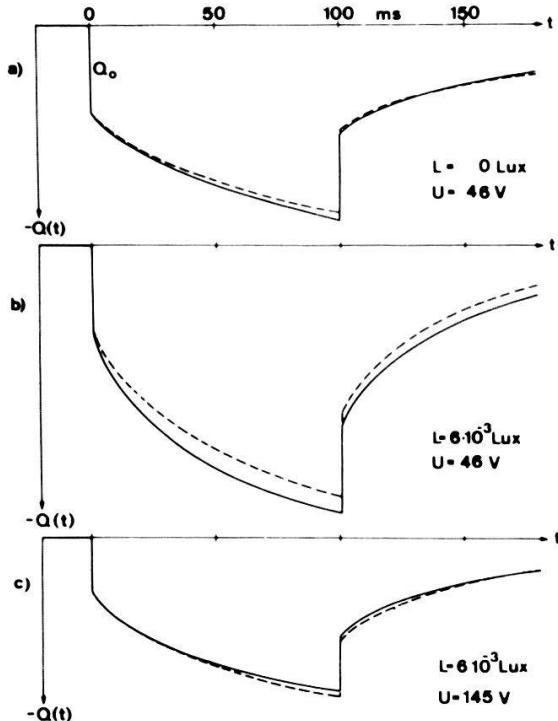


Fig. 4 Time evolution of $Q(t)$ for $U_o > 0$ (—) and $U_o < 0$ (---). Pulse length 100 ms. The signal obtained for $U_o < 0$ is inverted.

$$\left. \frac{\delta p}{\delta t} \right|_{t=0} = s \cdot \frac{\bar{\mu} \cdot E_o \cdot p_0}{s \Delta + \bar{\mu} \cdot E_o \cdot p_0}$$

where $p_0 = \sqrt{\frac{s}{r}}$ = steady state value of p
for $U_o = 0$.

s = generation rate ($\text{cm}^{-3} \text{ sec}^{-1}$) and

r = recombination constant of electron-hole pairs

$\bar{\mu}$ = drift mobility of electrons

E_o = electric field at the boundary of the illuminated strip.

If $s \cdot \Delta \ll \bar{\mu} \cdot E_o \cdot p_0$ then the rise does not depend either on the mobility of negative carriers $\bar{\mu}$ ($E_o > 0$) or the positive carriers $\bar{\mu}$ ($E_o < 0$). Therefore exact inverse time evolutions $Q(t)$ are obtained for a small production rate

$s \cdot \Delta$ (Fig. 4a) and a large electrical field E_o (Fig. 4c).

These results show the capability of the method. The quantitative analysis of the production and mobility of charge carriers in CdSe is the subject of present investigations.

We greatly acknowledge the valuable help of E. Bolz and H. Zollinger in preparing the samples.

4. References

- [1] Data sheet OPAl11, Burr-Brown Corp. Int. Airport Industrial Park, Tucson, Arizona 85734, USA (April 1984)
- [2] D.R. Pratt, M.E. Langmuir, R.A. Baudreau and R.D. Rauh, J. El. Chem. Soc. 128, 1627 (1981)

ETUDE DU CONTACT ALUMINIUM SUR LE a-Si:H

G. Bugmann, D. Erni et P. Kocian, Institut de Physique Appliquée,
EPFL, CH-1015 LAUSANNE, Suisse

Résumé : Le contact Al sur a-Si:H est ohmique immédiatement après son évaporation et devient redresseur après chauffage à 220 °C. L'Al déposé sur une couche non oxydée produit une zone de dépletion dans le a-Si:H. Sur une couche fortement oxydée, par contre, il produit une zone d'accumulation. Une mince couche d'oxyde a pour seul effet de réduire la conduction par effet tunnel à travers la jonction, ce qui peut améliorer le rendement de cellules solaires de type Schottky.

1. Introduction

Nous fabriquons du a-Si:H par décomposition de silane dans un plasma DC. La qualité de ce semiconducteur, destiné à la fabrication de cellules solaires, est mesuré au moyen de sa photoconductivité. Les contacts utilisés sont deux bandes d'Al évaporées côté à côté sur la couche, elle même déposée sur du verre. Il a été rapporté que les contacts Al sont ohmiques avec des champs en-dessous de 50 V/cm (1) et entre 4 et 8 kV/cm (2). Il a été observé par ailleurs (3) que l'Al déposé sur le a-Si:H formait une bonne diode de Schottky, améliorée par un chauffage à 200 °C mais détériorée par un chauffage à 250 °C. Pour notre part, le contact Al, sur des couches non-dopées, s'est révélé être ohmique après évaporation, puis redresseur après chauffage à 220 °C. La contradiction apparente entre ces divers résultats nous a incité à étudier le contact en aluminium sur le silicium amorphe hydrogéné.

2. Appareillage

Les couches sont déposées sur un substrat en verre Corning 7059 mesurant 25 X 25 X 1.3 mm. Leur épaisseur est de 0.5 à 0.7 µm. Deux contacts en Al mesurant 7 X 1.5 mm et distants de 0.5 mm sont évaporés à travers un masque peu de temps après la déposition et sans que la couche n'ait eu de contact avec l'air. Durant le transport de l'évaporeuse vers l'enceinte de mesures électriques, la couche est exposée à l'air pendant moins d'une minute puis mise sous vide à 10^{-7} Torr. Pour les mesures de photoconductivité la couche est

éclairée à travers un hublot à l'aide d'une source de lumière filtrée pour fournir 22 W/m^2 ($5 \cdot 10^{15}$ photons/cm 2 sec) entre 400 et 500 nm.

3. Mesures et résultats

3.1 Méthode : Pour obtenir des informations sur les propriétés du contact Al nous avons évaporé à côté de celui-ci un contact en Cr ou en Al (fig.1).

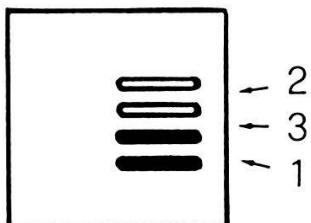


Fig.1 Contacts en Al (1), en Cr (2) et contacts hybrides Al-Cr (3).

Nous avons ensuite mesuré séparément les caractéristiques I(V) sous éclairage de couples de ces contacts puis de couples hybrides de contacts Al-Cr et Al recuit-Al non-recuit. Dans le cas Al-Cr nous avons également mesuré la différence de potentiel photovoltaïque induite par l'éclairage. Ceci nous a indiqué le sens des courbures de bandes

près des contacts. Pour nous affranchir de l'effet d'augmentation de résistivité dû à un éclairage prolongé (4) nous avons chauffé les couches à 220°C sous vide avant d'effectuer les mesures.

3.2 Effet du chauffage sur le contact : En fig.2 nous voyons que la photoconductivité de la couche mesurée à l'aide du couple de contacts 2, évaporé sur la couche après qu'elle eut subi un cycle de température, est parfaitement indépendante de la tension. Le couple de contacts 1, qui a vécu le cycle de température avec la couche, présente une photoconductivité améliorée aux tensions élevées et un minimum à basse tension. En effectuant les mesures 3+ et 3- entre un contact ohmique non chauffé et un contact chauffé nous constatons un minimum de conductivité que dans le cas 3- où les électrons circulent du contact chauffé vers la couche. Le chauffage transforme donc ces contacts Al ohmiques en jonctions pn (p coté Al, n coté a-Si:H).

La photoconductivité mesurée à l'aide des contacts 1 est meilleure que celle mesurée à l'aide des contacts 2 suggérant que le contact chauffé offre moins de centres de recombinaisons que le contact non chauffé. Celui-ci devrait ainsi son caractère ohmique à une grande densité d'états d'interface entre l'Al et le a-Si:H créés lors de l'évaporation de l'Al. A ce moment l'emplacement du contact est éclairé par la lumière du filament d'évaporation et est soumis à l'impact des atomes d'Al. Ne connaissant pas la technique de dé-

position de contacts des auteurs de la ref.3 nous ne pouvons comparer nos résultats aux leurs.

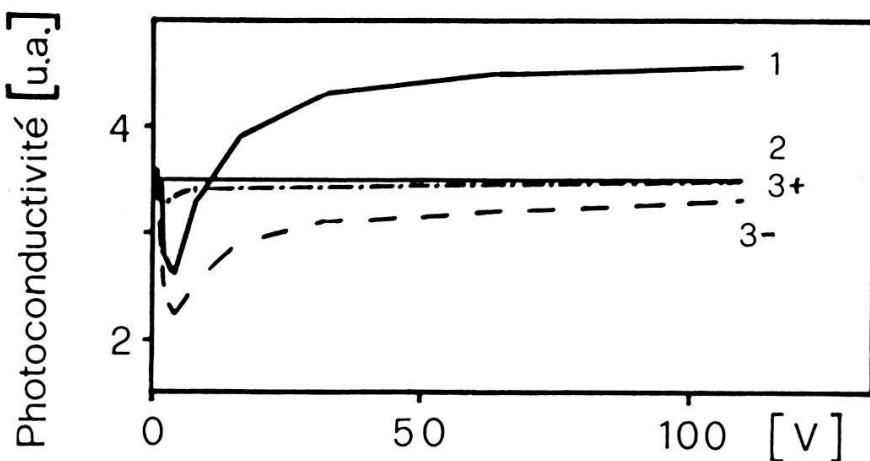


Fig. 2

3.3 Effet de l'oxyde : Nous avons évaporé 3 paires de contacts Al sur une même couche à différent stades d'oxydation: D'abord sur la couche non oxydée puisque transportée par boîte à gants sous Argon du réacteur vers l'évaporeuse, ensuite sur la couche exposée pendant quelques minutes à l'air, puis après plusieurs semaines d'exposition à l'air. Les mesures de photoconductivité en fonction de la tension

(fig.3) donnent les résultats suivants :

- (a) le contact sur la couche non-oxydée est bloquant et indique une zone de dépletion dans la couche. La conduction à très basse tension étant due à l'effet tunnel;
- (b) sur la couche légèrement oxydée, seul l'effet tunnel est réduit;
- (c) sur la couche fortement oxydée la conductivité diminue avec la tension,

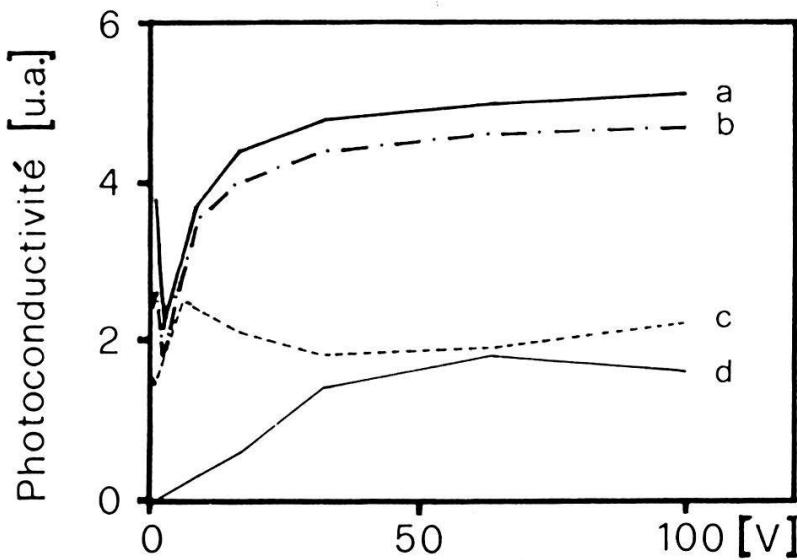


Fig. 3

signifiant une zone d'accumulation s'épuisant. A très basse tension, l'oxyde réduit plus fortement la conductivité; (d) un contact Cr évaporé sur la couche fortement oxydée signale au contraire une zone de dépletion. Ceci a été également observé par Street (5) qui le met sur le compte de l'oxyde plutôt

que du Cr. Le fait que l'Al, déposé sur le même oxyde, cause une zone d'accumulation, alors que sans oxyde il formait une zone de dépletion, suggère que l'Al et l'oxyde de Si ont formé, lors du chauffage, un composé aux propriétés électroniques nouvelles.

4. Conclusion

Le chauffage à 220°C forme une jonction entre l'Al et le a-Si:H du type pn ou np selon l'état d'oxydation du a-Si:H avant l'évaporation. L'apparition de la jonction étant accompagnée d'un diminution du nombre d'états d'interface la qualité photovoltaïque du contact s'en trouve améliorée. Enfin, une mince couche d'oxyde réduit le courant de tunnel dans la jonction ce qui peut sans-doute expliquer l'augmentation de rendement observé sur des cellules solaires de type Schottky fabriquées à l'aide de couches légèrement oxydées (7).

5. Références

- (1) P.A.Thomas et J.C.Flachet, Phil.Mag.B 51(1985) 55
- (2) W.E.Spear et P.G.Lecomber dans "Photoconductivity and related Phenomena" de J.Mort et D.M.Pai, Elsevier, 1976
- (3) C.C.Tsai et al., Physica 117b & 118b(1983) 953
- (4) D.L.Staebler et C.R.Wronski, J.Appl.Phys. 51(1980) 3262
- (5) R.A.Street et al., Phil.Mag.B51(1985) 1
- (6) R.J.Nemanich et al., J. of non Cryst. Sol. 59&60(1983) 513
- (7) C.R.Wronski et al., Journal de Physique 42(1981)C4-475

Laser produced cermet-like $Ti-Ti_xO_{1-x}$ thin film structures

M. Thuillard, M. von Allmen

Institute of Applied Physics, Sidlerstrasse 5, CH - 3012 Bern

Pulsed laser irradiation of thin, vacuum-deposited layers of Ti on suitable substrates produces structures consisting of small metallic islands connected by oxyde filaments. The topology as well as the dimensions of the structure can be controlled by proper selection of the laser and the film parameters. The electrical characteristics can be varied from metallic to percolating, with resistances changing by 10 orders of magnitude. We will discuss the mechanisms producing these structures as well as their electric properties.

ANDO V : Raumforschung, Kosmologie, Atmosphäre

Zum solaren Neutronenereignis vom 3. Juni 1982

H. Debrunner, E. Flückiger, F. Golliez, M. Schubnell und G. Sebor
Physikalisches Institut, Sidlerstrasse 5, 3012 Bern

Neutronen der aktiven Sonne konnten im interplanetaren Raum erstmals am 21.6.1980, und seither noch am 3.6.1982 und am 24.4.1984 mittels Satelliten nachgewiesen werden. Die Neutronen der Sonneneruption vom 3.6.1982 wirkten sich ebenfalls auf die kosmischen Strahlungsregistrierungen der Neutronenmonitore auf Jungfraujoch, Lomnický Štít sowie in Rom aus. Die Analyse der Beobachtungsdaten dieses bisher einzigartigen Ereignisses liefert neue Erkenntnisse über die Beschleunigungsmechanismen bei solaren Flares und über die Injektion der solaren Neutronen in den interplanetaren Raum.

Kosmische Strahlungsmessungen als Mittel zur Untersuchung magnetosphärischer Stromsysteme

E. Flückiger und W. Scuntaro
Physikalisches Institut, Sidlerstrasse 5, 3012 Bern

Bei starker geomagnetischer Aktivität nimmt die Intensität der auf die Erde einfallenden kosmischen Strahlung vielfach signifikant zu. Diese Intensitätsanstiege sind auf Stromsysteme zurückzuführen, die während magnetischen Stürmen in der Magnetosphäre aufgebaut werden. Zwischen den Parametern der Stromsysteme und den Veränderungen der Grenzsteifigkeiten für kosmische Strahlung bestehen quantitative Zusammenhänge. Kosmische Strahlungsmessungen sind demnach ein zusätzliches Mittel zur Untersuchung der gestörten Magnetosphäre, was am Beispiel des magnetischen Sturms vom 17.12.1971 gezeigt wird.

Kinetische Temperaturen von Helium- und Sauerstoffionen im Sonnenwind

R.E. Joos
Physikalisches Institut, Universität Bern, Sidlerstrasse 5, 3012 Bern

Zwei konkurrierende Prozesse bestimmen die kinetischen Temperaturen der Ionen im Sonnenwind: Wellenheizung führt zu gleichen thermischen Geschwindigkeiten aller Ionen, d.h. zu Temperaturen, die proportional zu den Massen der Ionen sind. Andererseits können Coulombstöße - wenn die Dichte des Sonnenwindplasmas genügend gross ist - einen Ausgleich der kinetischen Energien und damit der Temperaturen der Ionen bewirken. Aufgrund einer verfeinerten Auswertung von Daten, die während vier Jahren mit der ISEE-3-Raumsonde registriert worden sind, finden wir $T(O^{6+}) = (3.8 \pm 1.9) \cdot T(He^{2+})$. D.h. die Temperaturen der Teilchen im Sonnenwind werden offenbar meistens durch Wellenheizung bestimmt; nur in wenigen Fällen dominieren Coulombstöße.

ANDO VI : Physikalische Chemie, Medizin, Biophysik

PROTON MAGNETIC RELAXATION DISPERSION IN FIBRINOGEN SOLUTIONS:
A MODEL FOR RELAXATION IN PROTEIN SOLUTIONS.

S.Conti , DPMC, Inst. de physique , Univ. de Genève , 1211 SWITZERLAND

ABSTRACT: Analysis of T_1 ($50 \text{ Hz} < \nu < 60 \text{ MHz}$) and T_2 ($2 \text{ kHz}, 25 \text{ MHz}$) in fibrinogen solutions under various conditions and confrontation with similar data from polymerized forms of the protein lead to a consistent relaxation picture and to quantitative agreement with the usual concept of protein hydration layer. A major feature is that single proton transfers , rather than whole water molecules , are relevant to the chemical exchange between bulk and bound H_2O .

INTRODUCTION

Fibrinogen is a large protein (MW 340 000) which forms , through activator induced aggregation , the polymeric network responsible for blood clotting. We present here a preliminary account of an extended study of proton magnetic relaxation in fibrinogen solutions and fibrin gels. Only the salient features and the main conclusions are presented. Details on experimental procedures , calculations and experimental results may be found in reference {1} .

EXPERIMENTAL RESULTS

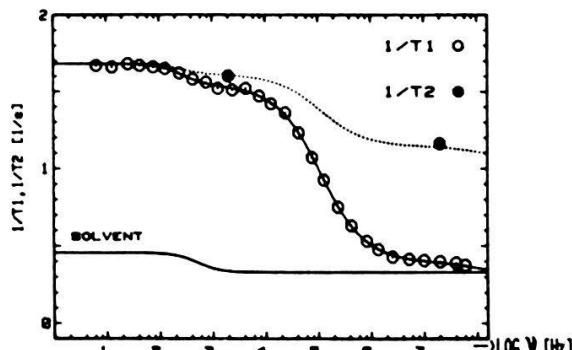
The frequency dependence of $1/T_1$ in fibrinogen solutions (fig.1) shows three stages within the frequency range investigated here , including the small dispersion only partially observed above 10 MHz.

The main dispersion centred near .11 MHz reflects a correlation time $\tau_0 = .8 \mu\text{s}$ assigned to Brownian tumbling of the proteins. This value , ten fold larger than expected for a spherical molecule of MW 340000 , suggests a highly assymetric shape for fibrinogen, in accordance with numerous other data {2} .

The low field dispersion , also present in the protein-free buffer, arises from a $^{17}\text{O}-\text{H}$ coupling within the few (.037%) H_2^{17}O molecules present in water and reflects a mean residence time $\delta_p = .7 \text{ ms}$ for protons on H_2O at neutral pH. Solid circles in fig.1 show $1/T_2$ values measured at 2 kHz and 25 MHz. The tiny difference between T_1 and T_2 at 2 kHz is due to the above-mentioned coupling which brings a non vanishing contribution to $1/T_2$ at all frequencies. Discounting this $^{17}\text{O}-\text{H}$ contribution , T_2 is essentially equal to T_1 at low magnetic field , as expected for extrem narrowing conditions.

$1/T_1$ is insensitive to pH at high fields , but becomes strongly pH-dependent at low fields , a behaviour essentially related to the main dispersion whose amplitude $A(\text{pH})$ follows -fortuitly- a simple titration curve (fig.2a). This evolution is partly due to a pH-dependence of τ_0 (fig.2b) assigned to confor-

Fig.1 Spin-lattice (○) and spin-spin (●) relaxation rates in fibrinogen solutions as function of frequency ($c = 10 \text{ g/l}$, $\theta=28^\circ\text{C}$, pH7).



mational changes of the protein, and partly to a pH-regulated contribution of exchangeable protein protons. The latter point is clearly brought out by isotopic dilution experiments, made at 2 kHz for several pH values, which allowed separation of A into two components, A_m and A_p , respectively proportional to $x = \{\text{H}_2\text{O}\}/(\{\text{H}_2\text{O}\} + \{\text{D}_2\text{O}\})$ and independent of x (fig.3). The pH-dependence of A_m ($\div \tau_0(\text{pH})$) is reminiscent of bound water protons in fast exchange with free water, whereas A_p shows the main features expected for slow exchanging protein protons, i.e. no proportionality to $\tau_0(\text{pH})$ and increasing contribution at high pH due to acid-base catalysed exchange of Arg, Lys and Tyr protons.

According to the temperature dependence of A (fig.4a), chemical exchange between free and bound water becomes slow enough below $\sim 15^\circ\text{C}$ to affect relaxation. This effect - only observed near neutral pH and hence suggesting acid-base catalysed exchange - is much more pronounced for polymerized forms of fibrinogen (fig.4b) whose low field relaxation time are sufficiently shortened through the aggregation process to invalidate fast exchange condition on the whole temperature range investigated here.

Fig.2 Amplitude of the main dispersion (a) and correlation time τ_0 (b) as function of pH
($c = 20 \text{ g/l}$, $\theta = 28^\circ\text{C}$).

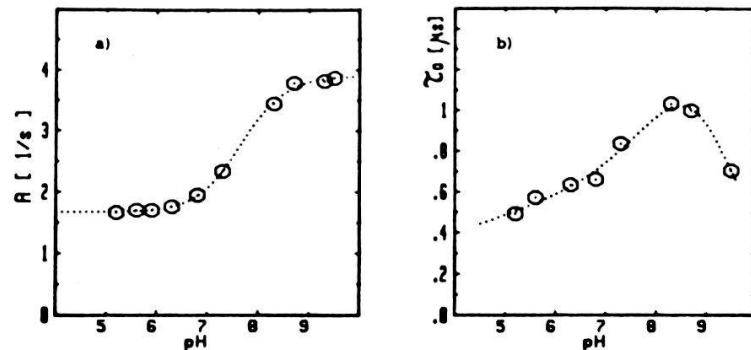


Fig.3 Decomposition of the amplitude of the main dispersion $A(\text{pH})$ into bound water $A_m(\text{pH})$ and protein protons $A_p(\text{pH})$ components, according to isotopic dilution data.
(curves a and b derived from figs. 2a and 2b, curve c = (a-b)).

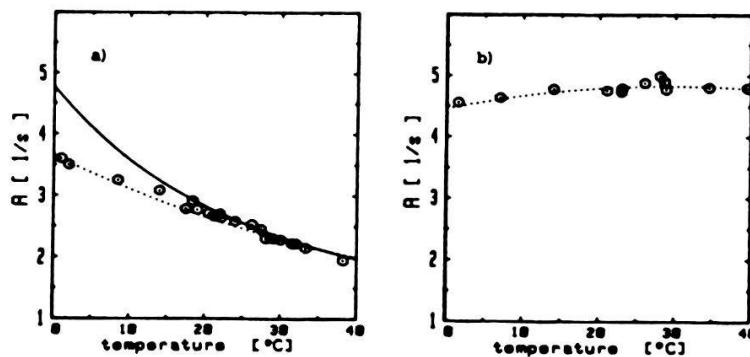
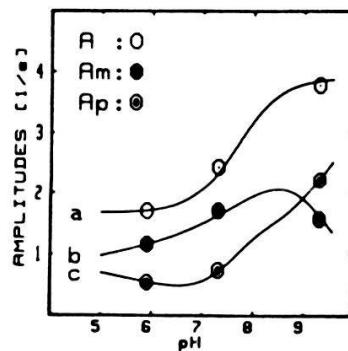


Fig.4 Amplitude of the main dispersion as function of temperature for fibrinogen sols (a) and gels (b), ($c = 20 \text{ g/l}$, pH 7):
- continuous curve: expected behaviour for fast bound water exchange
- dotted curves: bound water exchange with $\delta_m = 0.6 \text{ ms}$ (28°C), $E_{act} = 1.8 \text{ kcal/M}$.

DISCUSSION

Confrontation of the whole set of experimental data from the present investigations gives a consistent picture for magnetic relaxation in these systems. The global relaxation scheme, shown in fig.5, involves four phases interconnected with chemical exchange paths and magnetization transfer by cross-relaxation.

The non-labil protons (phase Q) don't directly contribute to the observed magnetization, but merely act as relaxation sinks for peripheral protons (phase P) which in turn - through a slow pH-regulated exchange with solvent - give rise to part of the main dispersion.

Bound water protons (phase M) contribute to both main and high field dispersions, a fact which is explained by a slight anisotropy in the mean orientation of bound H₂O relative to the protein surface. According to the model of Halle and Wennerström {3}, the global bound water dynamics is then determined by the anisotropic bound water reorientation (correlation time τ_c , order parameter $\langle p \rangle$) as well as by Brownian tumbling of the protein (τ_o), and gives thus rise to two dispersions.

In figure 1, the continuous curve associated to $1/T_1(v)$ results from a fit with a theoretical expression based on the above scheme. The dotted curve indicates the expected frequency dependence of $1/T_2(v)$ as deduced from $1/T_1(v)$ (i.e. without fitting $1/T_2$ data) and shows that both low field and high field spin-spin relaxation rates are fully compatible with spin-lattice relaxation data within the present scheme.

Table 1 gives a summary of the microscopic parameters deduced for fibrinogen solutions at 28 °C and neutral pH. A quantitatively coherent picture is obtained for the hydration layer: the number of bound H₂O amounts to ~30% of dry fibrinogen weight - a typical value for most proteins {4} - whereas $\langle p \rangle$ as well as τ_c values are in agreement with presumed anisotropy {5} and rate {6} of bound water reorientational motions.

The similarities between the proton residence time on H₂O (δ_p) and its lifetime in the bound water phase (δ_m), which are both pH-regulated and moreover have almost the same maximum value near neutral pH, strongly suggest that single proton transfers, rather than H₂O transfers, are the relevant exchange mechanism between bound and bulk water.

Fig.5 Global relaxation scheme.

- W : free water
- M : bound water
- P : exchangeable protein protons
- Q : non-labil protein protons
- Rt: magnetization transfer through cross-relaxation
- Em: water protons exchange
- Ee: protein protons exchange with solvent

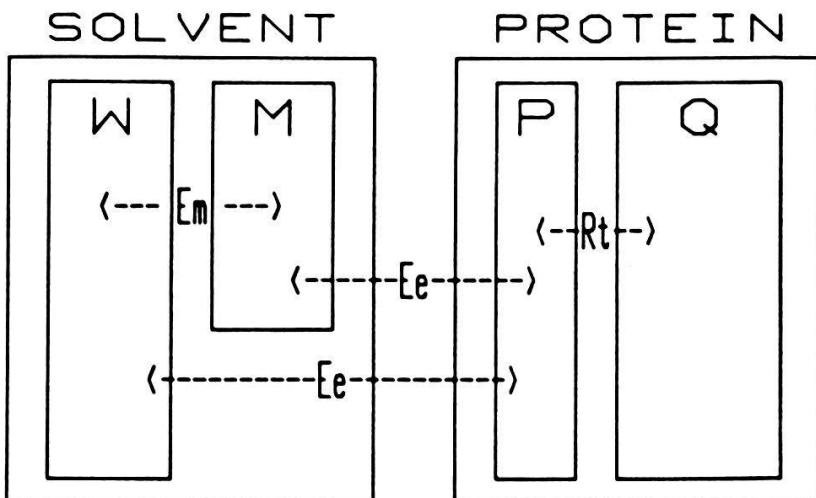


TABLE 1: Microscopic characteristics associated to fibrinogen solutions
 ($\theta = 28^\circ\text{C}$, pH7) according to relaxation dispersion data.

Brownian protein tumbling	:	$\tau_o = .8 \mu\text{s}$
Bound water reorientation	:	$\tau_c \approx .2 \text{ ns}$ order parameter $\langle p \rangle = .07$
Extent of hydration layer	:	$N \approx 6000 \text{ H}_2\text{O/protein}$
Proton life-time on a H_2O molecule	:	$\delta_p = .7 \text{ ms}$
Proton life-time in bound H_2O phase	:	$\delta_m = .6 \text{ ms}$

CONCLUSION

A qualitative account has been given on some salient features shown by proton magnetic relaxation in fibrinogen solutions. A substantial amount of relaxation data on different polymerized forms of fibrinogen, only scarcely mentioned here, were useful in order to get a coherent relaxation picture. The outcomeing relaxation model is consistent with a wide set of experimental data, including T_1 and T_2 dependences on magnetic field, temperature, pH and isotopic dilution for both SOL and GEL states of fibrinogen, and is therefore thought to be valid for other aqueous biopolymer systems.

REFERENCES

- {1} S.CONTI "Dispersion de la relaxation magnétique des protons dans les solutions et les gels à base de fibrinogène"
Thesis, Univ. of Geneva, 1984
- {2} R.F.DOOLITTLE, Haemostasis and Thrombosis, ch.11, Ed. L.Bloom and D.P.Thomas, 1981
- {3} B.HALLE and H.WENNERSTROM, J. Chem. Phys. 75, p. 1928, 1981
- {4} R.COKE and I.D.KUNTZ, Ann. Rev. Bioph. Bioeng. 3, p.95, 1974
- {5} B.HALLE, T.ANDERSON, S.FORSEN and B.LINDMAN,
J. of Am. Chem. Soc. 103, p.500, 1981
- {6} I.D.KUNTZ and W.KAUZMANN, Adv. Prot. Chem. 28, p.239, 1974

REVERSIBLE UND IRREVERSIBLE PLASMACHEMISCHE REAKTIONEN IN DER ELEKTRISCHEN ENTLADUNG

P. Kocian, D. Erni, G. Bugmann, Institut de physique appliquée, EPFL
Lausanne

In den elektrischen Entladungen, wo die chemischen Reaktionen existieren ist es wichtig ob diese Entladungen im stehenden oder im fliessenden Gas verlaufen. Dabei muss man zwei unterschiedliche Fälle beachten, nämlich ob diese Reaktionen reversible oder irreversible sind. Wir haben beide Typen untersucht: eine Sauerstoffentladung, wo eine reversible Reaktion $O_2 \rightleftharpoons O_3$ verläuft und eine Silanentladung mit den irreversiblen Reaktionen $SiH_4 \rightarrow Si_x H_y$ ($x=1,2$; $y=0-3$). Wir haben die U-I Charakteristiken, elektrisches Feld, Gastemperatur und Elektronentemperatur untersucht. Wir haben festgestellt, dass diese Parameter im stationären Zustand von der Gasströmungsgeschwindigkeit und der Strömungsrichtung abhängig sind. Die Resultate können zur Optimisierung der Ozonerzeugung oder der a-Si Abscheidung dienen.

ANDO VII : Materialien, Molekülphysik

LASER ISOTOPE SEPARATION BY COMBINING ISOTOPICALLY SELECTIVE CONDENSATION WITH
INFRARED VIBRATIONAL PREDISSOCIATION

J.-M. Philippoz*, B. Calpini, H. van den Bergh*, R. Monot, Institut de Physique Expérimentale et *Institut de Chimie-Physique, EPFL, CH-1015 Lausanne, Switzerland

IR photon absorption by a van der Waals molecular cluster can induce its dissociation. When this happens in the collision free part of a molecular beam, some of the excess energy is degraded to translational energy, and the cluster photofragments recoil away from each other, depleting the beam axis. Fig. 1 shows a measurement of this phenomenon. A cluster beam obtained from the supersonic expansion of 0.5 % SF₆ in Ar is crossed with a cw CO₂ laser beam tuned at 10 P 34 line to vibrationally predissociate mainly the ³²SF₆)₂Ar_m clusters [1]. The abundance of the ³²SF₆ molecule in space is measured with a mass spectrometer which could be displaced perpendicularly to the beam axis. The changes in ³²SF₆ intensity due to the IRVP of the clusters (laser on - laser off) are reported as a function of the lab. angle. The results of Fig. 1

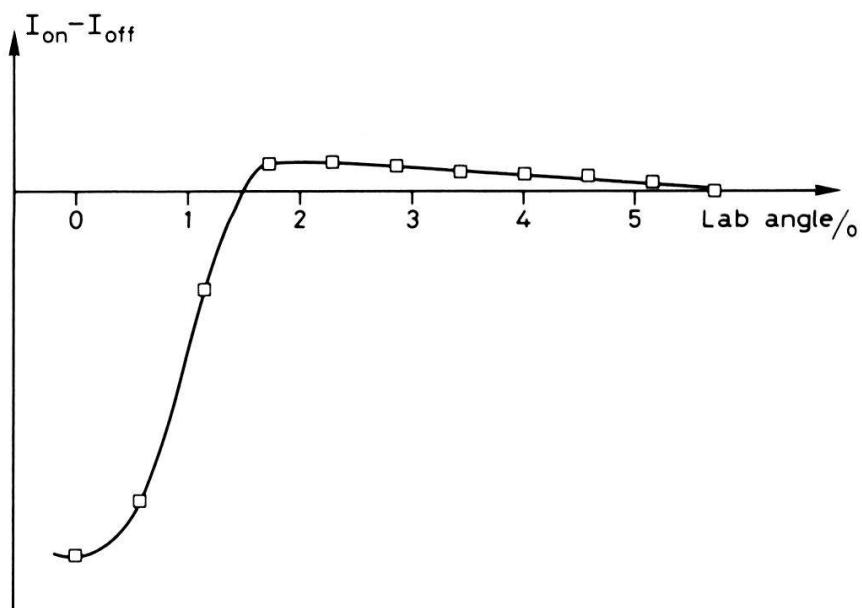


Fig. 1 : The changes in SF₆ beam profile due to infrared vibrational predissociation and the consecutive fragment recoil. The laser power is 15 W at the 10 P 34 line where mainly ³²SF₆)₂Ar_m clusters are dissociated. T₀ = 235 K, P₀ = 1.3 bar. 0.15 % SF₆ in Ar. The recoil of the IRVP fragments causes a decrease in SF₆ intensity near the beam centroid (0° lab. angle) and increases the SF₆ intensity away from the beam centroid ($\theta_{\text{lab.}} > 1.5^\circ$).

clearly show that the recoil of the IRVP fragments causes a decrease in $^{32}\text{SF}_6$ intensity near the beam centroid and an increase of $^{32}\text{SF}_6$ intensity away from the beam center.

We have recently demonstrated that such an effect can be successfully applied to isotopically enrich or deplete the beam axis in a chosen isotopomer [2]. The condition for the selectivity of such a method is that the IRVP spectra for clusters of different isotopomers do not overlap. This may be a limiting factor in the case of heavily clustered beams. We report here that one can overcome such problems by using a second laser in addition to the laser used for the IRVP. This other laser is focussed near the nozzle throat in the collisional region of the free jet expansion and is tuned to vibrationally excite the free molecule of a given isotopomer. It has been demonstrated [3] that a laser power of only a few kW/cm^2 can completely inhibit the cluster formation of the excited isotopomer, while de condensation of the other isotopomers is essentially uninhibited. The principle of this two laser method is shown in Fig. 2. If for example $^{32}\text{SF}_6$ molecule is vibrationally excited by the laser focussed at the nozzle exit the formation of clusters containing this

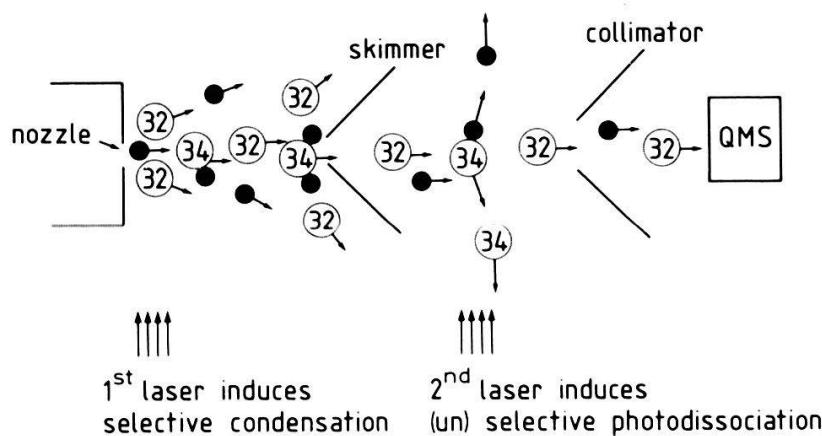


Fig. 2 : A schematic representation of the 2-laser isotope separation method. The first IR laser selectively excites $^{32}\text{SF}_6$ in the collisional part of the free jet, thus inhibiting the formation of clusters containing $^{32}\text{SF}_6$. The $^{34}\text{SF}_6$ condenses to $^{34}\text{SF}_6\text{Ar}_m$ clusters. A second laser then removes the $^{34}\text{SF}_6$ from the center of the molecular beam by IR vibrational predissociation followed by recoil of the fragments. The latter takes place in the collision free part of the gas expansion. (32) represents a $^{32}\text{SF}_6$ molecule, (34) represents a $^{34}\text{SF}_6\text{Ar}_2$ cluster, and ● is an Ar atom. QMS is a quadrupole mass spectrometer.

molecule is inhibited [4]. In the collision free part of the beam we then have $^{32}\text{SF}_6$ free molecules, and clusters containing $^{33}\text{SF}_6$ and $^{34}\text{SF}_6$. IRVP of these clusters will eject $^{34}\text{SF}_6$ and $^{33}\text{SF}_6$ photofragment out of the beam center, leaving the trajectory of the $^{32}\text{SF}_6$ molecules unchanged, and thus provoking an enrichment in ^{32}S at the beam centroid. Fig. 3 shows the result of the enrichment factor for $^{34}\text{SF}_6$ caused by IR vibrational predissociation. The solid line data are taken with only the IRVP laser on. The observed enrichment or depletion as a function of laser frequency can be interpreted due to the known IRVP

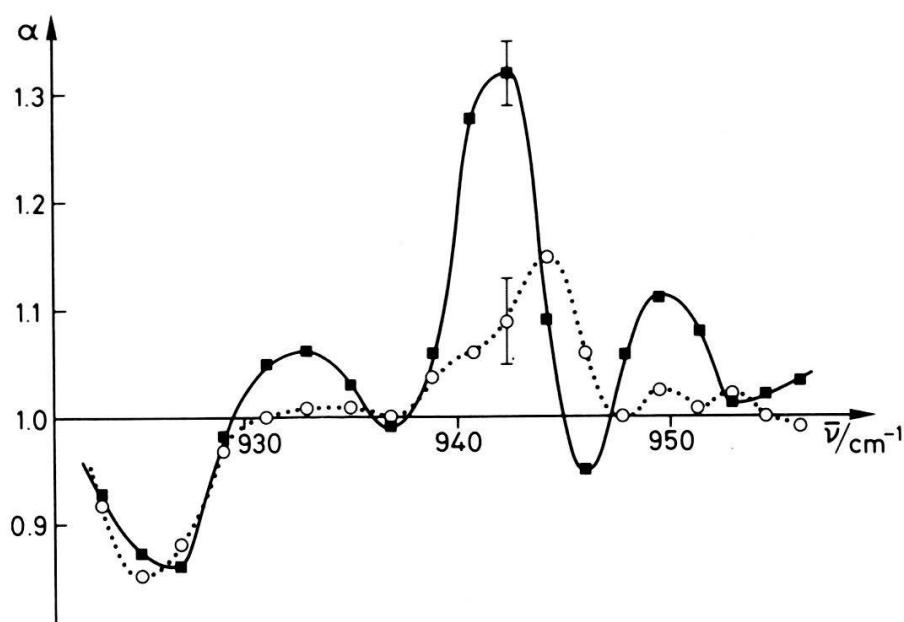


Fig. 3 : The overall enrichment factor $\alpha^{1)}$ for enrichment in $^{34}\text{SF}_6$ by IR vibrational predissociation. The results represented by the solid line are taken only with laser 2, the dotted line gives results obtained with laser 2 together with laser 1, the latter inhibiting condensation of $^{32}\text{SF}_6$. Laser 1 with 10 W at the 10P16 line. Laser 2 with about 15 W. 0.15 % SF₆ in Ar. P_O = 1.3 bar, T_O = 235 K.

spectra of the clusters. The dotted line is obtained with the 2nd laser on, tuned to inhibit the condensation of $^{32}\text{SF}_6$. One expects all clusters containing $^{32}\text{SF}_6$ to decrease in abundance, and this is actually observed by the reduced enrichment in $^{34}\text{SF}_6$ between 930 and 955 cm^{-1} (where mostly clusters containing $^{32}\text{SF}_6$ are dissociated). However, the concentration of $^{34}\text{SF}_6\text{Ar}_{(m)}$ which photo-dissociate at around 923 cm^{-1} is virtually unchanged. Thus irradiation with a laser at 946 cm^{-1} (to excite $^{32}\text{SF}_6$ molecule) combined by IRVP in the region between 923 and 928 cm^{-1} will result in a spatial separation of isotopes in

which $^{32}\text{SF}_6$ is concentrated near the beam centroid.

Finally we suggest another two laser scheme for isotope separation. We have recently measured fluorescence spectra produced in exciting I_2 - rare gas clusters above the dissociation continuum of I_2 [5,6]. A cage effect is responsible for the relaxation which is followed by the fluorescence. This cage effect in clusters can be used in a beam isotope separation method. Suppose we have a beam containing unclustered molecules of a given isotopomer (because of the effect of an appropriate laser which inhibits the condensation at the nozzle throat), together with clusters of the other isotopomer. A laser irradiation of the beam in the collision free region to produce an electronic excitation above the dissociation level of the molecule would result in the following : unclustered molecules would dissociate and the photofragment would be ejected out of the beam axis whereas the clustered molecules would not dissociate because of the cage effect and remain close to the beam axis, thus causing a corresponding isotope enrichment. An example of such a separation would be the case of the separation of $^{79,81}\text{Br}$ in Br_2 clustered in a molecular beam.

Acknowledgment

We thank the Swiss Fonds National for financial support.

References

1. J.-M. Philippoz, J.-M. Zellweger, H. van den Bergh, R. Monot, Surface Science, to be published.
2. J.-M. Zellweger, J.-M. Philippoz, P. Melinon, R. Monot, H. van den Bergh, J. Phys. Chem. 88 (1984) 3936.
3. J.-M. Philippoz, J.-M. Zellweger, H. van den Bergh, R. Monot, Phys. Rev. Letters
4. P. Melinon, R. Monot, J.-M. Zellweger, H. van den Bergh, Chem. Phys. 84 (1984) 345.
5. J.-M. Philippoz, B. Calpini, R. Monot, H. van den Bergh, Helv. Phys. Acta, same issue.
6. J.J. Valentini, J.B. Cross, J. Chem. Phys. 77 (1982) 572.

THE PHOTOLYTIC CAGE EFFECT OF IODINE IN SMALL VAN DER WAALS CLUSTERS

J.-M. Philippoz*, B. Calpini, R. Monot and H. van den Bergh*, Institut de Physique Expérimentale and *Institut de Chimie-Physique, EPFL, CH-1015 Lausanne, Switzerland

The phenomenon broadly spoken of as the "solvent cage effect" is one of the focal points in chemical kinetics [1]. Part of our improved understanding of this effect, which involves solvent induced changes in reactivity and pathways, is due to studies on the iodine model system [2]. Iodine solvent interactions were already of interest at the turn of this century [3,4], but studies of the photolytic cage effect of iodine only started in the 1950's [5]. The subject has been reviewed recently by Troe [6], who infers two important mechanisms for solvent caging: "stabilisation in clusters" and "cage energy relaxation". Apparently at typical solvent densities at atmospheric pressure a significant contribution of the cluster mechanism can not be ruled out. Recently this cage effect in clusters has been observed directly in a molecular beam [7,8], where irradiation of I_2M_n van der Waals complexes ($M = Ar, C_6H_6$, etc.) above the dissociation limit of their B state [9] lead to fluorescence from the $B^3\Pi_{0+u}$ state of free I_2 . This fluorescence implies effective decomposition of the I_2M complexes to form iodine molecules, i.e. caging :



Valentini and Cross [8] dispersed this fluorescence and found $I_2B^3\Pi_{0+u}$ molecules in vibrational states $380 - 1880 \text{ cm}^{-1}$ below its dissociation limit. Thus clustering of a single Ar atom to I_2 can efficiently prevent the photodissociation of I_2 by solvent caging. Such detailed experiments are also suitable for comparison with model calculations [10,11].

In the present work we report on I_2 cage effects with a single rare gas atom attached (I_2M with $M = He, Ne, Ar$) and we show that ΔE (the energy released as relative translational energy in $I_2M + h\nu \rightarrow I_2 + M + \Delta E$) is larger for $M = He, Ne$ than for $M = Ar$, contrary to trends observed in the series $M = Ar, Kr, Xe$ [10,12].

The supersonic free jet is generated by the expansion of a mixture of I_2 heated to $70 - 80^\circ C$ ($P_{I_2} \sim 10$ torr) and between 100 torr and 20 atm. of a rare gas through a 0.1 mm sonic nozzle. We excite the I_2M complexes with a chopped argon ion laser which is focussed onto the free jet perpendicular to the flow direction. The fluorescence is collected at right angles to both beams, is dispersed (2.5 Å resolution), detected by a Hamamatsu R928 photomultiplier, and amplified by a lock-in amplifier. A typical spectrum obtained for I_2 diluted in He is shown in Fig. 1. This spectrum is attributed to the $B \rightarrow X$ band system of

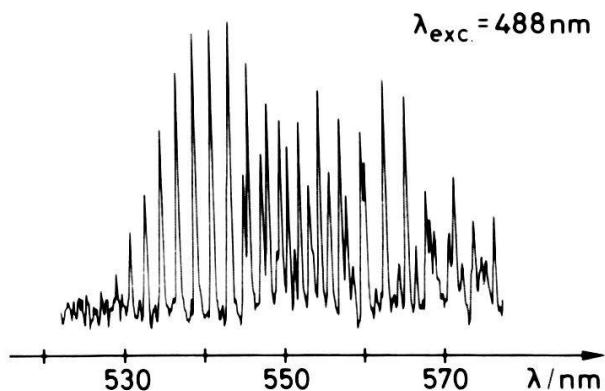


Fig. 1 : Fluorescence from free I_2 ($B^3\Pi_0^+ \rightarrow X^1\Sigma^+$) produced by $I_2He + h\nu \rightarrow I_2^* + He$ at 488 nm, above the I_2He B state dissociation limit. The stagnation pressure (P_0) is 20 bar. Laser power ~ 3 W. Excitation at 4 mm downstream from the nozzle. The fluorescence involves vibrational transitions from $v' = 18 - 33$ to $v'' = 0 - 3$.

free iodine formed by the photodissociation of I_2He above the dissociation threshold for the following reasons: 1) The quantum yield for photodissociation of free I_2 at 488 nm is 1 [13], i.e. there can be no fluorescence following direct excitation of I_2 . 2) The relative peak heights of the fluorescence spectrum do not change upon irradiating 8 mm rather than the usual 4 mm downstream from the nozzle, where the pressure is much lower. This rules out significant perturbation of the observed rovibrational distributions by collisional energy transfer at 4 mm. It also excludes $B \rightarrow X$ fluorescence arising from the combination of iodine atoms ($I + I^* + M \rightarrow I_2^* + M$). 3) The fluorescence spectra are observed at low stagnation pressures and when the fluorescence intensity depends essentially quadratically on the rare gas pressure. This implies that I_2M is involved, the concentration of which depends quadratically on the pressure of M [9a]. Some contributions from such species as $(I_2)_2M$ and I_2M_n with $n > 1$ can not be completely excluded at this point. 4) Fluorescence from I_2M^* can be excluded due to the known spectral shifts of the I_2M spectrum relative to the I_2 spectrum [9].

Fluorescence spectra have been recorded for three excitation energies: 20141 cm^{-1} (496.5 nm), 20492 cm^{-1} (488 nm) and 20986 cm^{-1} (476.5 nm). All three

are above the B state dissociation limits of I_2He , I_2Ne and I_2Ar (respectively 20048, 20050 and 20058 cm^{-1} [9]). The observed experimental intensities are converted, to a first approximation, to relative vibrational populations of the iodine B state by normalising for laser power, relative absorption cross section for I_2M absorption (taken to be equal to that of free I_2 [14]), and the Franck-Condon factors [15]. The results for I_2He are shown in Fig. 2. Two

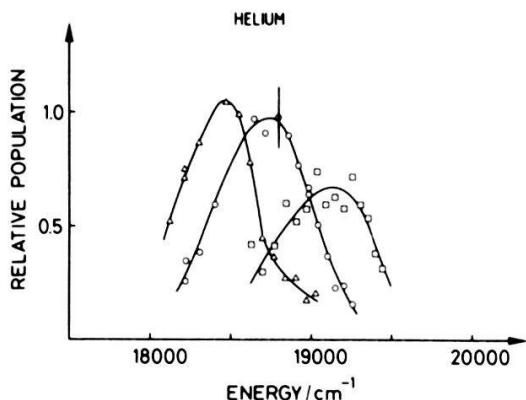


Fig. 2 : The relative populations of different vibrational levels of the B state of free I_2 obtained by the photolysis of I_2He at photon energies of 20141 cm^{-1} (Δ), 20492 cm^{-1} (\circ), and 20986 cm^{-1} (\square). $P_O = 2 \text{ bar}$, $T_O = 378 \text{ K}$. The energy of the vibrational levels is relative to $X^1\Sigma^+$ ($v'' = 0$, $J'' = 0$).

trends are observed which are also found in the case of I_2Ne and I_2Ar : Increasing the excitation energy leads to A) a decrease in the cage effect, and B) a shift in the energy distribution of the I_2B state molecules to higher vibrational energies. The latter implies that the average energy loss in the single solvent atom cage effect observed here is nearly independent of the excitation energy above the dissociation threshold at the applied conditions. This is shown in Fig. 3 for He, Ne and Ar. Fig. 3 also indicates that the average

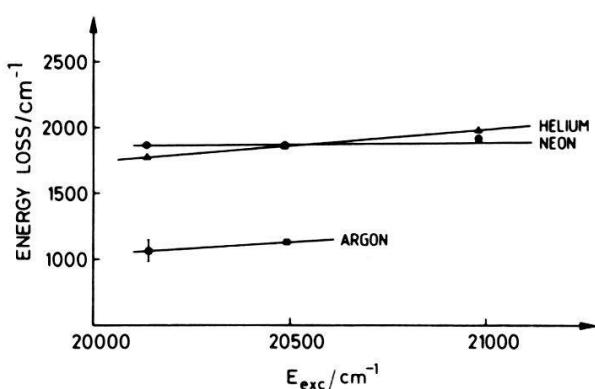


Fig. 3 : The most probable energy lost by the cage effect in the photo-dissociation of I_2M ($M = \text{He}, \text{Ne}, \text{Ar}$) at 3 excitation energies, measured by the fluorescence from the B state of the I_2 product. Stagnation conditions are $T_O = 378 \text{ K}$, $P_O(\text{He}) = 2 \text{ bar}$, $P_O(\text{Ne}) = 1.5 \text{ bar}$, $P_O(\text{Ar}) = 0.7 \text{ bar}$.

energy lost is much larger in the case of I_2He and I_2Ne (both about 1850 cm^{-1}) than in the case of I_2Ar (about 1150 cm^{-1}). The data on I_2Ar agree well with the measurements of reference 8 and the calculations of reference 10. The trend of an increasing energy loss with increasing mass of the inert gas atom in I_2M ,

which was observed [10,12] in the series M=Ar, Kr, Xe, is reversed in the series M=He, Ne, Ar where the greater energy losses are observed for the lighter "solvents". Preliminary data at higher resolution indicate low rotational "temperatures" of about 10 - 30 K, and increasing rotational temperatures in the series I₂He, I₂Ne, I₂Ar. Model calculations on the cage effect in clusters, in particular I₂He and I₂Ne are very desirable at this point.

Further measurements on the cage effect in I₂M clusters have been completed for M=H₂, N₂, O₂, CO₂ and I₂, and will be reported together with measurements on other carrier gases and measurements on the cage effect of van der Waals clusters containing Br₂.

Acknowledgment

We thank J.-M. Scherrer for his help with preliminary measurements and the Swiss Fonds National for financial support.

References

1. S.A. Adelman, Adv. Chem. Phys. 53 (1983) 61.
2. J.-C. Dutoit, J.-M. Zellweger and H. van den Bergh, J. Chem. Phys. 78 (1983) 1825.
3. M. Loeb, Z. Phys. Chem., Stoechiom. Verwandtschaftsl. 2 (1888) 606.
4. J.H. Hildebrand, J. Am. Chem. Soc. 31 (1909) 26.
5. R. Marshall and N. Davidson, J. Chem. Phys. 21 (1953) 2086.
6. B. Otto, J. Schroeder and J. Troe, J. Chem. Phys. 81 (1984) 202.
7. K.L. Saenger, G.M. Mc Clelland and D.R. Herschbach, J. Phys. Chem. 85 (1981) 3333.
8. J.J. Valentini and J.B. Cross, J. Chem. Phys. 77 (1982) 572.
9. a) R.E. Smalley, D.H. Levy and L. Wharton, J. Chem. Phys. 64 (1976) 3266.
b) J.E. Kenny, K.E. Johnson, W. Sharfin and D.H. Levy, J. Chem. Phys. 72 (1980) 1109.
c) K.E. Johnson, W. Sharfin and D.H. Levy, J. Chem. Phys. 74 (1981) 163.
10. I. NoorBatcha, L.M. Raff and D.L. Thompson, J. Chem. Phys. 81 (1984) 5658.
11. F.G. Amar and B.J. Berne, J. Phys. Chem. 88 (1984) 6720.
12. J.B. Cross and J.J. Valentini, to be published.
13. D.H. Burde, R.A. Mc Farlane and J.R. Wiesenfeld, Phys. Rev. A10 (1974) 191.
14. J. Tellinghuisen, J. Chem. Phys. 58 (1973) 2821.
15. J. Tellinghuisen, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 19 (1978) 149.

LASER INDUCED SURFACE REACTIONS IN MICROELECTRONIC TECHNOLOGY

D. Braichotte, K. Ernst*, R. Monot, J.-M. Philippoz, M. Qiu**, H. van den Bergh, Institut de Physique Expérimentale et Institut de Chimie-Physique, EPFL, CH-1015 Lausanne, Switzerland

Electrical contacts in microcircuits are generally made by photolithography, which is a multistep process. Recently, focussed laser beams have been used to produce very small conducting metallic strips by a single step process, in which metalorganic compounds are decomposed on, or close to, the surface of a device [1]. Such a laser direct writing method can be easily integrated with existing device production techniques based on metalorganic chemical vapor deposition. Lasers can also be used in microcircuit production/modification for the photochemical etching of very small surface areas, or for highly localised doping [1]. We distinguish basically two kinds of laser chemical vapor deposition (LCVD). 1) Pyrolytic LCVD, in which a focussed laser beam heats up a small surface area, and metal deposition follows pyrolysis of metalorganic molecules striking the hot surface. 2) Photolytic LCVD, in which molecules on or near the surface are photodissociated to generate metal atoms (often by a poorly understood mechanism). In some cases it may be preferable to use a combination of the two. It appears from the cases we have studied so far [3,4] that photolytic LCVD often leads to amorphous metal deposits with relatively low electrical conductivity (possibly in part due to the high fraction of ligand material incorporated in the deposits), whereas pyrolytic LCVD leads to polycrystalline deposits of low resistivity (several times bulk resistance for Cu and Pt [4]). Here we describe some new results on the LCVD of Sn, as well as the deposition of a thin film of Cu_2S from a reaction between solid Cu and gaseous CS_2 . The latter presents an interesting example in which a laser is used to change the chemical and physical properties of a surface.

Experimental

The setup is shown in Fig. 1. A 1 W cw Ar^+ laser is frequency doubled and the green light (514.5 nm) is separated from the 0.5 mW UV beam (257 nm). The two beams enter the gas cell from opposite sides and are focussed on the same area of the transparent substrate (a $\sim 100 \text{ \AA}$ amorphous carbon disc

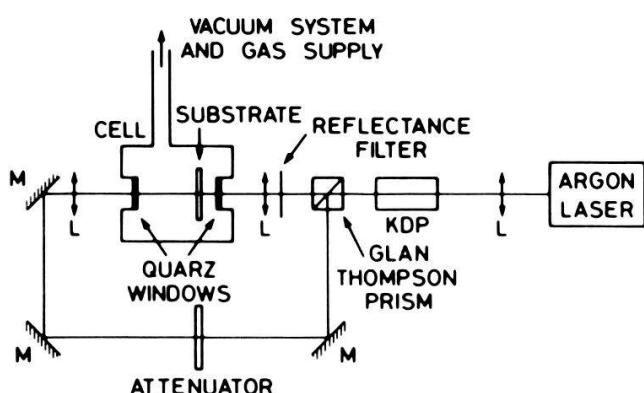


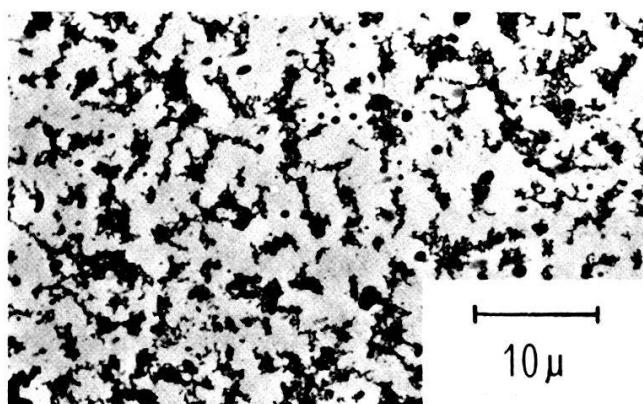
Fig. 1 : Experimental set-up.

supported on a fine copper grid). The cell can be translated mechanically to produce a metallic strip rather than a circular deposit. $\text{Sn}(\text{CH}_3)_4$ (Ventron 99.5 %) and CS_2 (Fluka 99.5 %) are used at room temperature. Copperbis-hexafluoroacetylacetone, $\text{Cu}(\text{HFAcAc})_2$ [4], was heated to 363 K for LCVD experiments.

Results and discussion

Does photolytic LCVD take place in the gas phase, or are mainly molecules adsorbed on the surface involved ? To answer this, $\text{Sn}(\text{CH}_3)_4$ was irradiated by the focussed UV beam (about 600 W cm^{-2} at the focal point) in the gas phase, far away from any surface. The presence of relatively large tin clusters of photochemical origin in the gas phase is easily recognized due to intense scattering of the green laser beam which was passed through the focal point of the UV beam in the opposite sense. Placing a carbon disc below the UV laser beam, with its surface parallel to the beam, permits the collection of Sn clusters which are being pulled down by gravitation. A similar "laser snow" effect has been observed previously [5]. The "gravitationally" deposited particles were found to be essentially amorphous, and in general quite large (see Fig. 2) as compared to the particles found in "normal" photolytic LCVD with the laser beam perpendicular to the surface [3]. Thus we have shown that photodeposition of molecules from the gas phase does take place, and is

Fig. 2 : Transmission electron micrograph of tin particles from the photolysis of 30 torr of $\text{Sn}(\text{CH}_3)_4$ "gravitationally" deposited on a carbon disc. This particular sample was deposited with the 4th harmonic of a Nd-Yag laser operating at 10 Hz with average power of 10 mW at 265 nm for 10 min. The laser was focussed with a 5 cm focal length quartz lens with the UV beam parallel to the disc surface.



followed by condensation and/or coagulation processes which lead to the formation of sizable particles which drop out of the gas phase [6]. Such large particles are not observed in photolytic LCVD with the laser beam focussed at the surface and directed perpendicular to the surface, possibly indicating that the gas-phase mechanism is not predominant here.

The combination of photolytic LCVD with some local heating of the surface may be advantageous to obtain fairly pure metallic strips with a minimal incorporation of ligand material (i.e. with good electrical conductivity and good surface adherence). Furthermore one wants to avoid excessive heating of the device as may be the case in pyrolytic LCVD. Thermal warping of the surface and other kinds of damage (such a diffusion of the dopants etc.) may result, in particular for compounds that pyrolyse at high temperatures. Furthermore, as device surfaces may not show homogeneous absorption/reflection of the laser light from one spot to another, optimal conditions of pyrolytic LCVD will then change from one place to another, thus complicating the procedure. Hence we were lead to undertake a study of thermally assisted photolytic LCVD. Here we report on the deposition rates, which were found to increase substantially (in one case more than a factor of three) due to the addition of green light. The intensity of the green light is kept so low that by itself it causes no deposition at all. Several explanations can be put forward for this apparently thermal enhancement of the UV deposition rate. One possibility is that fragments of the metalorganic compound which still contain the metal atom undergo a secondary thermal decomposition, freeing the metal atom, at relatively low temperature. A photolysis of the fragment with green light can not be ruled out completely. Heating the surface may also help to liberate the surface from ligand material (by reaction on the surface and evaporation) thus freeing the surface sites for new metal deposition. Another explanation may be that the gas near the heated surface is warmer. Increased diffusion rates may also increase the photolytic deposition rate. More experiments as well as possible modelling will be necessary to establish the mechanism.

In the next section of this paper we discuss an experiment in which a Cu_2S film is produced by pyrolytic LCVD. When the 514.5 nm Ar^+ beam is focused on the copper grid which supports the carbon disc, in the presence of 80 torr of CS_2 gas, a deposit is formed on the disc near the focal point. Electron diffraction showed that crystalline Cu_2S was formed as well as some

$\text{Cu}_{1.8}\text{S}$. For the beam power densities used no reaction is observed and the Cu grid is not attacked either chemically or thermally in the absence of CS_2 . In the presence of CS_2 a large hole is burned in the Cu wire, and the Cu_2S deposit is observed on the carbon disc. Clearly a chemical reaction is taking place. One may suggest that CS_2 molecules striking the hot surface decompose to release sulphur atoms which then react with the copper. The Cu_2S formed is then further heated and evaporates from the surface to condense elsewhere, thus liberating a fresh layer of copper surface for attack. Such laser induced surface reactions may be used to cover surfaces with a thin layer of a compound which possesses useful chemical or physical properties.

In the final part of this paper we show a scanning electron microscope (SEM) picture (Fig. 3) of a metallic copper strip generated by pyrolytic LCVD

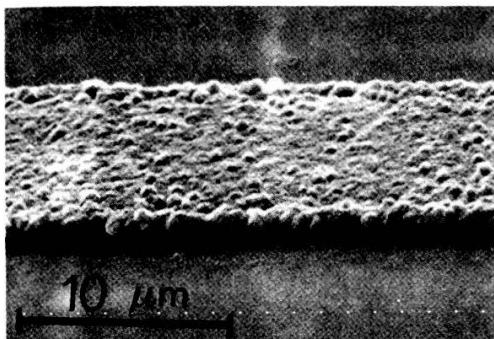


Fig. 3 : SEM picture of a copper ohmic contact formed by pyrolytic LCVD on glass. The scale is indicated by the measure at the bottom left of the picture. The temperature of the cell containing the $\text{Cu}(\text{HF}Ac\text{Ac})_2$ is 263 K, and the writing speed $10 \mu\text{m s}^{-1}$. The power density of 514.5 nm light is 60 kW cm^{-2} . Writing speeds up to 0.5 mm s^{-1} still give deposits of acceptable quality.

of $\text{Cu}(\text{HF}Ac\text{Ac})_2$ on glass. Measurement of the electrical resistance of these strips, which can be less than $10 \mu\text{m}$ wide, gives resistivity values as low as three times bulk.

Acknowledgment

The authors are grateful to the Swiss Fonds National for financial support

References

1. Laser Processing and Diagnostics, D. Bäuerle Ed., Springer Series in Chem. Phys. 39 (Springer, Berlin 1984).
2. M. Qiu, R. Monot and H. van den Bergh, Scientia Sinica A27 (1984) 531.
3. D. Braichotte and H. van den Bergh, in reference 1, p. 183.
4. D. Braichotte and H. van den Bergh, in press.
5. K. Ernst in "Photon assisted collisions and related topics", Harwood Academic Publishers (1982) 321.
6. T.H. Wood, J.C. White and B.A. Thacker, Appl. Phys. Lett. 42 (1983) 408.

* Permanent address : Institute of Experimental Physics, Warsaw University.

** Permanent address : Shanghai Institute of Laser Technology.

ANDO VIII : Optik, Spektroskopie

SPECTROSCOPIE D'AGREGATS ALCALINS ULTRAFROIDS

G. Delacrétaz et L. Wöste, Institut de Physique Expérimentale, EPFL, CH-1015 Lausanne, Switzerland

Résumé : Les agrégats alcalins fortement refroidis sont produits par détente supersonique de la vapeur métallique (~ 10 à 100 torrs) mélangée à un gaz porteur (1 à 10 bar d'Argon). Pour une pression du gaz porteur de 10 bars, la température rotationnelle de la molécule Na_2 est abaissée à 7 K. Les spectres d'absorption obtenus pour l'agrégat Na_3 présentent une structure vibrationnelle bien résolue; et 4 systèmes ont été observés dans la région spectrale étudiée (333 à 675 nm). Les résultats indiquent un important changement de géométrie lors de l'excitation électronique de l'agrégat.

Introduction

Les agrégats métalliques sont toujours produits avec une distribution de taille. Pour cette raison les méthodes de spectroscopie optique, telles que les mesures d'absorption, de fluorescence induite par laser et de spectroscopie Raman, sont difficilement applicables. Une première méthode pour résoudre ce problème en combinant la photodéflexion d'un jet moléculaire et une détection par spectrométrie de masse des agrégats défléchis a été proposée par Schumacher et al. [1]. La technique de ionisation résonante à 2 photons (TPI) s'est révélée beaucoup plus efficace, comme l'a montré ce même groupe [2]. Cependant la résolution des spectres de trimères alcalins n'a pu être améliorée malgré l'utilisation de lasers à colorants mono-mode de haute résolution [3].

Nous présentons ici les résultats obtenus pour le trimère Na_3 , formé dans une détente avec gaz porteur. Le plus grand refroidissement produit avec l'aide du gaz porteur a permis de résoudre la structure vibrationnelle des spectres observés.

Partie expérimentale

L'arrangement expérimental est décrit en détail dans la réf. 4. Les agrégats très froids sont formés dans la co-expansion de 10 à 100 mbars de vapeur métallique et de 1 à 10 bars d'Argon à travers un orifice de 50 μm de diamètre. La pression dans la 1ère chambre est maintenue au-dessous de 10^{-2} mbar. Le jet atteint par un orifice de 1 mm de diamètre, la chambre de mesure où la

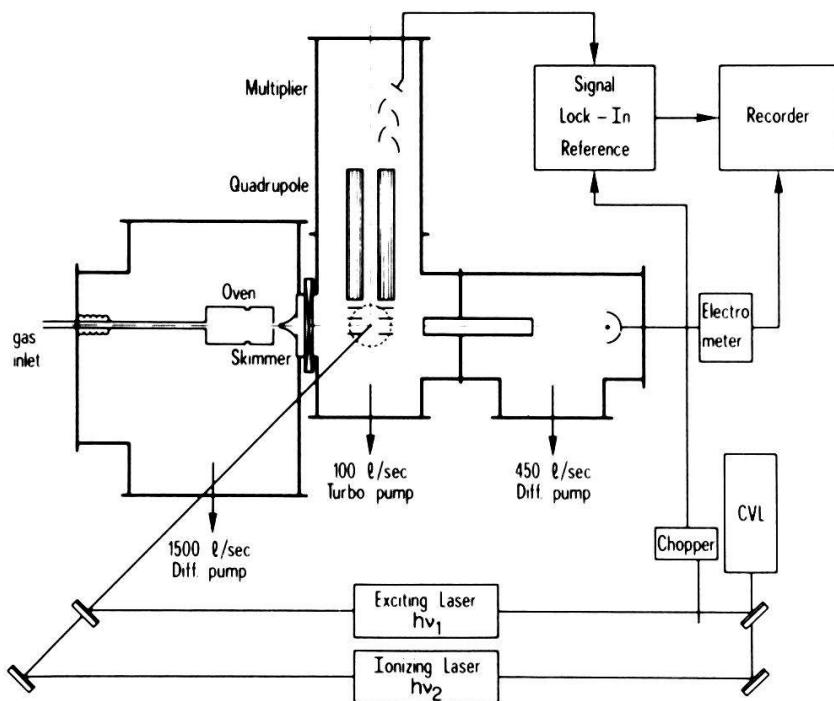


Fig. 1 : Arrangement expérimental

pression est maintenue au-dessous de 10^{-6} mbar. Dans cette chambre les agrégats sont excités puis ionisés à l'aide de deux lasers à colorants pompés par un laser à vapeur de cuivre. Les agrégats photoionisés sont extraits perpendiculairement et analysés en masse à l'aide d'un spectromètre de masse quadrupolaire. Une détection synchrone a été utilisée dans ce cas pour discriminer les processus à 2 photons de même énergie. Pour des longueurs d'onde d'excitation inférieures à 600 nm environ, un laser à colorant pompé par un laser excimer a été utilisé pour exciter et ioniser simultanément les agrégats.

Résultats et discussions

Le spectre de masse obtenu pour le sodium est présenté à la figure 2. Dans ce cas les agrégats ont été photoionisés à l'aide d'une lampe à vapeur de mercure puis analysés par un spectromètre de masse quadrupolaire. On remarque la présence d'agrégats Na_n $n \leq 12$, n étant limité par le domaine de masse du quadrupole utilisé. On remarque aussi la présence d'agrégats mixtes $\text{Na}_m \text{K}^{39}$ dû à la présence de potassium en impureté dans le sodium utilisé.

L'influence de la pression du gaz porteur sur la température des agrégats est présentée dans la fig. 3. Dans le cas du Na_3 (fig. 3a) la température rotationnelle est de 60 K pour une pression d'Argon de 0,8 bar, ce qui correspond approximativement aux conditions de détente de la vapeur métallique pure.

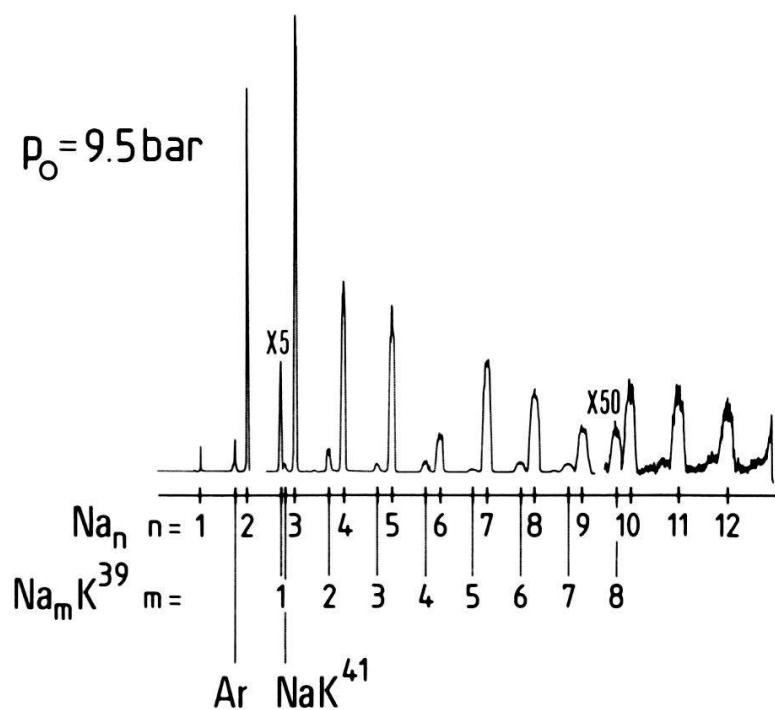


Fig. 2 : Spectre de masse du jet moléculaire. Les agrégats sont photoionisés à l'aide d'une lampe à vapeur de mercure.

Lorsque la pression est augmentée à 9,5 bars, la température tombe à 7 K et le rapport signal sur bruit est amélioré. L'effet dû au refroidissement est encore plus grand pour le trimère Na_3 . Cet effet est présenté pour la transition observée dans la région 660 – 670 nm (fig. 3b). Pour une pression du gaz porteur de 1 bar, de larges pics d'absorption sont observés.

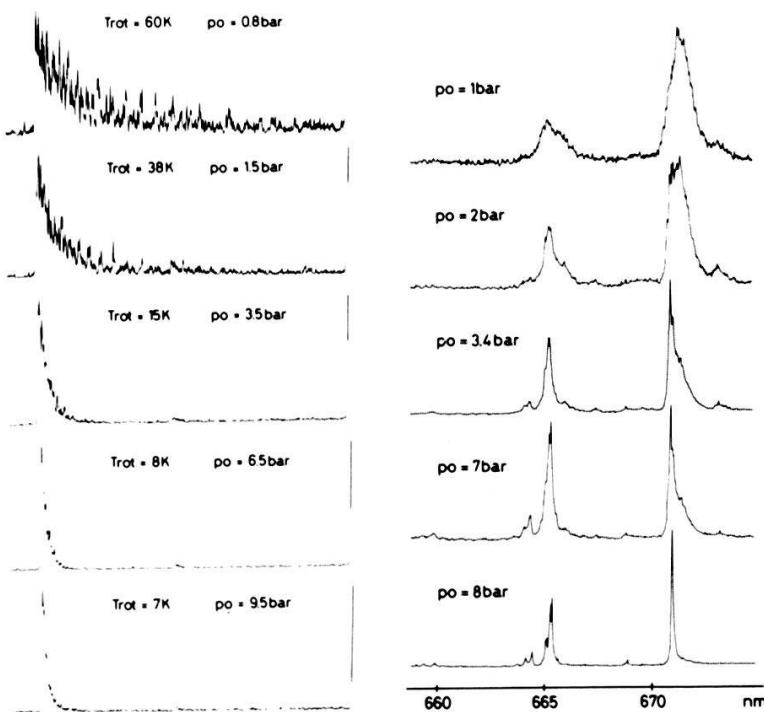


Fig. 3 : Effet de refroidissement en fonction de la pression du gaz porteur.
a) pour la transition $\text{Na}_2 \text{A} \leftarrow \text{X}$ ($9 \leftarrow 0$) et b) pour Na_3 dans la région 660 – 675 nm.

Cependant, lorsque la pression du gaz porteur est augmentée, le refroidissement est plus important et la structure des pics émerge. Ceci nous a permis d'observer pour la première fois des séquences vibrationnelles bien exprimées pour le trimère Na_3 .

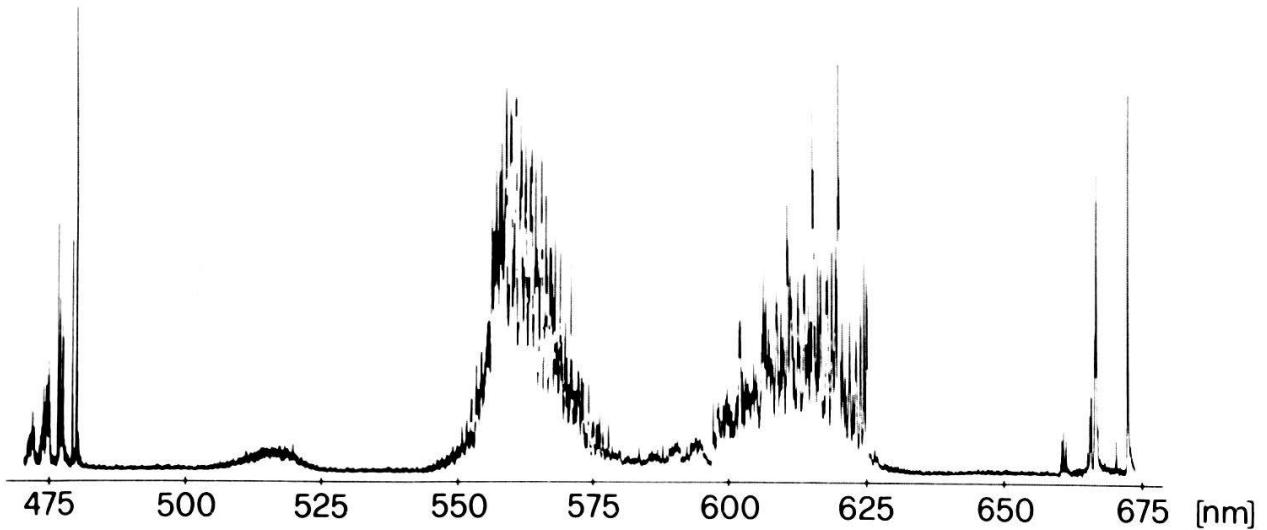


Fig. 4 : Spectre d'excitation de Na_3 de 470 à 675 nm.

Le spectre d'excitation de Na_3 a été systématiquement exploré de 700 à 330 nm et quatre systèmes ont été observés (fig. 4). Le premier système situé dans la région 660 - 675 nm présente une structure vibrationnelle peu étendue et pourrait correspondre à un état électronique dont la géométrie est proche de celle de l'état fondamental, qui est un triangle isocèle dont l'angle au sommet est de 80° selon de récents calculs ab-initio [5]. Le second système situé entre 600 et 625 nm présente une structure vibrationnelle plus étendue et devrait correspondre à une géométrie quasi-linéaire. Une autre géométrie encore devrait caractériser le système observé dans la région 550 - 575 nm. Enfin, la dernière transition observée aux environs de 475 nm semble correspondre à nouveau à une géométrie proche de celle de l'état fondamental. Une analyse détaillée est en cours.

Bibliographie

- [1] A. Herrmann, S. Leutwyler, E. Schumacher et L. Wöste, Chem. Phys. Lett. 62 (1979) 444.
- [2] A. Herrmann, S. Leutwyler, E. Schumacher et L. Wöste, Chem. Phys. Lett. 52 (1977) 418.
- [3] H.P. Härry, thèse de doctorat, Berne (1983)
- [4] G. Stein, G. Delacrétaz et L. Wöste, à paraître.
- [5] J.L. Martins, R. Car et J. Buttet, J. Chem. Phys. 78 (1983) 5646.

PROPRIETES DES CLUSTERS Ag_n^{\pm} SELECTIONNES EN TAILLE

P. Fayet et L. Wöste, Institut de Physique Expérimentale, EPFL, CH-1015
Lausanne, Switzerland

Introduction

L'émission ionique secondaire par bombardement ionique (SIMS) ou par bombardement de faisceaux neutres (FAB) est une technique standard d'analyse des surfaces. De plus, elle permet de générer des amas d'atomes mixtes ou homonucléaires, chargés positivement ou négativement aussi bien que neutres, de n'importe quels corps métalliques ou isolants. Cette méthode donne ainsi une alternative à la production de clusters par détente adiabatique [1], qui est restreinte aux éléments à haute pression de vapeur. Citons en particulier les travaux de F.M. Devienne et J.-C. Roustan qui par la méthode FAB ont produit des clusters positifs Ag_n^+ , U_n^+ , Nb_n^+ , etc, [2]. D'autre part, les études théoriques de Leleyter et Joyes expliquent par "la règle de parité" les oscillations d'intensité des pics de masse des clusters d'argent [3]. Les observations de spectrométrie de masse ne donnent, cependant, que peu de renseignements sur les propriétés optiques et dynamiques des particules obtenues par sputtering (émission ionique secondaire), et de plus, il est pratiquement impossible de distinguer la présence d'isomères.

C'est pourquoi, avant d'entreprendre n'importe quelle expérience sur les particules secondaires émises, il est nécessaire de les filtrer en masse. Notre dispositif expérimental est basé sur cette idée et comporte en fait trois systèmes quadripolaires, qui permettent l'étude d'une taille spécifique d'agrégats métalliques.

Appareil expérimental

La pulvérisation de la surface métallique (Ag, Ni, Al, Na, K, Cs, etc.) est obtenue par le bombardement d'un faisceau Ar^+ produit par une source de type CORDIS [4]. Les particules secondaires émises sont d'abord analysées en énergie, puis sont filtrées en masse par le premier spectromètre de masse quadripolaire (voir fig. 1). Le faisceau de particules mono-taille ainsi obtenu, pénètre alors dans le second dispositif quadripolaire de section identique au premier quadripôle mais de longueur triple (60 cm).

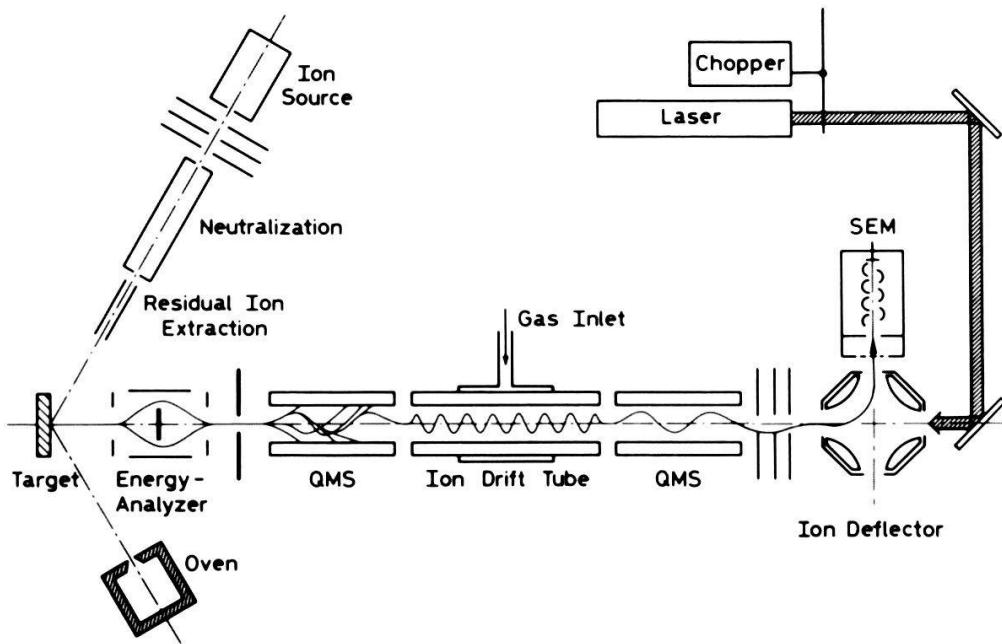


Fig. 1 : Montage expérimental

Ce dispositif fonctionne en mode non-discriminatif : le champ électrique RF confine les ions autour de l'axe de l'appareil sans distinction de masse; de plus, l'énergie cinétique de transfert des ions peut être choisie proche de l'énergie thermique. Dans ce quadripôle les ions piégés interagissent soit avec un faisceau laser, soit avec un gaz contenu dans la chambre de collision. Les produits des diverses interactions sont analysés par un troisième spectromètre de masse quadripolaire. La cible peut être bombardée, simultanément au faisceau d'ions Ar^+ , par une vapeur électropositive de césum provenant du four. Ceci permet d'abaisser le travail de sortie des électrons du métal et par suite d'augmenter le taux de ionisation négative des amas.

Résultats et discussion

Un spectre de masse des clusters d'argent ionisés négativement est montré à la figure 2. Il a été obtenu lorsque le premier spectromètre de masse quadripolaire était en mode discriminatif et le second, comme la trappe, en mode confinement (mode RF seulement).

La distribution d'intensité des particules Ag_n^- montre l'alternance paire-impaire décrite en [3]. Des oscillations similaires sur les ions positifs et sur les particules neutres reionisées ont été observées. L'élargissement des pics avec l'accroissement de la taille est due à l'augmentation du nombre de combinaisons des deux isotopes de l'argent.

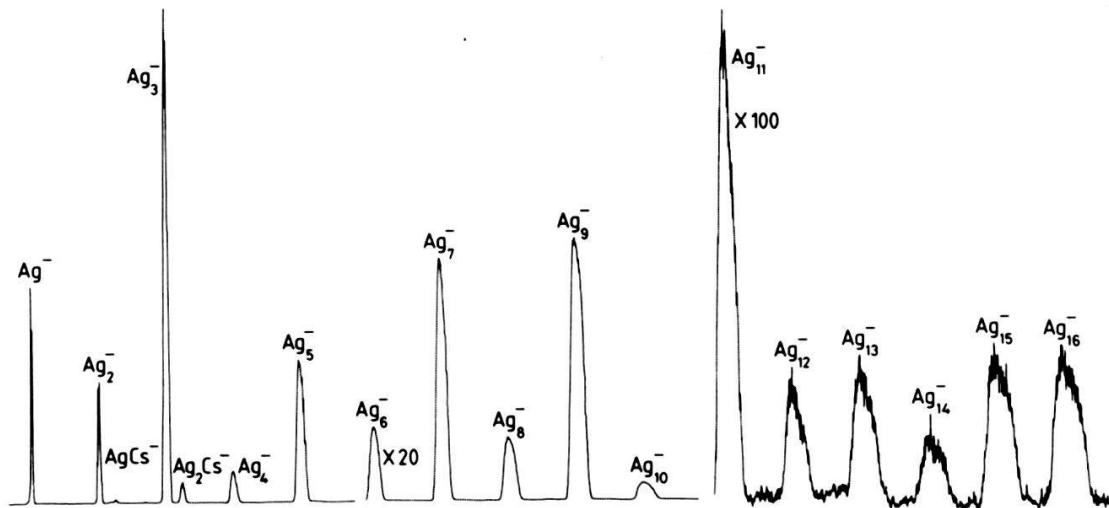


Fig. 2 : Spectre de masse des clusters d'argent chargés négativement.

Afin de caractériser les particules désorbées, il a été réalisé des mesures systématiques de la température vibrationnelle sur les dimères alcalins par des expériences de spectroscopie laser à un- et deux-photons (voir réf. [5]). Les résultats ont montré des températures supérieures à 1000 K et qui dépendent de l'espèce atomique.

Des mesures systématiques de photofragmentation ont été réalisées aussi bien sur les clusters chargés positivement que négativement. La figure 3 montre les canaux de dissociation des clusters Ag_n^+ ($n = 3, 5, 7, 9$) obtenus par détection synchrone du signal en phase avec un laser Ar-ion haché. Ces canaux sont obtenus soit à 488 nm soit à 514,5 nm, aucune différence notable n'a été observée pour ces deux longueurs d'onde. Il est à remarquer la faible puissance (1 Watt) du laser utilisé, ce qui montre que la section efficace de l'interaction est très grande. Ceci indique que les particules sont très instables en regard de la répulsion Coulombienne [6].

La figure 4 donne un exemple de réaction chimique induite par dissociation entre Ag_n^- et SF_6 . Les ions sont sélectionnés par le premier filtre de masse (fig. 4a et 4c). L'introduction du gaz SF_6 dans la chambre de réaction de la trappe provoque des dissociations par collisions et des produits de réactions bien visibles sur les spectres de masse 4b et 4d. La pression à l'intérieur de la chambre est de l'ordre de $2 \cdot 10^{-5}$ mbar et l'énergie cinétique des ions est de 10 eV. Les produits neutres d'interaction ne sont évidemment pas détectés mais la faible intensité des produits ionisés (environ 20 % de l'intensité

initiale sans gaz) et la forte électronégativité de la molécule SF_6 laisse entrevoir la possibilité que la plupart des clusters Ag_n^- ne sont pas dissociés, mais ont été simplement neutralisés par le gaz.

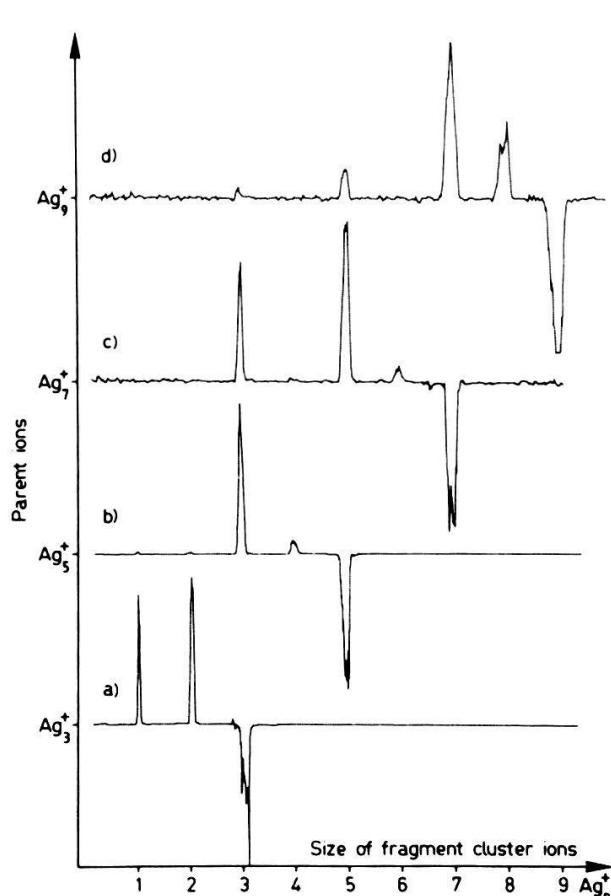


Fig. 3 : Canaux de photofragmentation des clusters Ag_n^+ , $n = 3, 5, 7, 9$ à 488 nm.

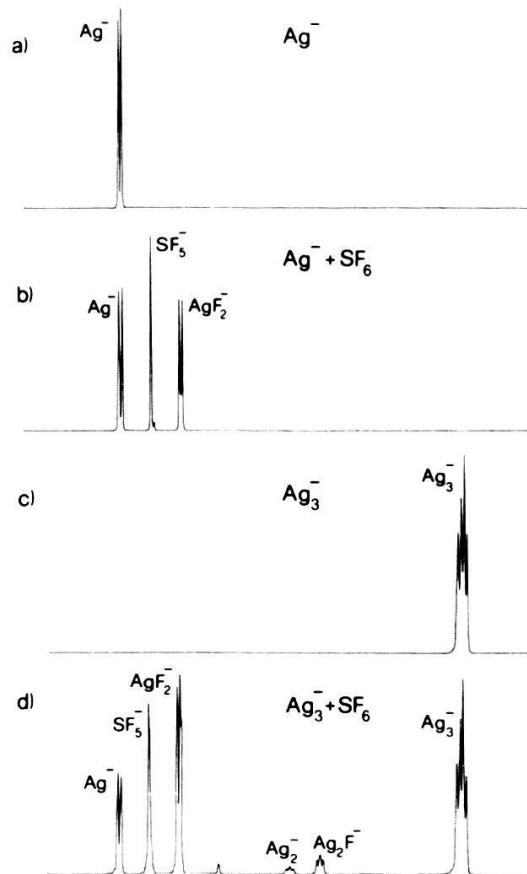


Fig. 4 : Réactions chimiques induites par collision des Ag_n^- dans SF_6 .

Bibliographie

- [1] K. Sattler, J. Mühlbach et E. Recknagel, Phys. Rev. Lett. 45 (1980) 821.
- [2] F.M. Devienne et J.-C. Roustan, Org. Mass. Spec. 17 (1982) 173.
- [3] P. Joyes et M. Leleyter, J. Phys. B 6 (1975) 150.
- [4] R. Keller, Symp. on Acc. Asp. of Heavy Ion Fusion, Darmstadt (1983).
- [5] P. Fayet, J.-P. Wolf et L. Wöste, to be published.
- [6] P. Fayet et L. Wöste, Surf. Sci., in press.

THE COLOUR OF HAFNIUM NITRIDE FILMS

A.J. Perry* and J. Schoenes, Laboratorium für Festkörperphysik, ETH-Zürich,
CH-8093 Zürich-Hönggerberg, Switzerland

Abstract : Variations in the colour of HfN films with composition, lattice parameter and distortion and film texture are discussed qualitatively in terms of an ionic model.

1. Introduction

Hafnium nitride films HfN_x can be made over a range of x from about 0.7 to 1.1. As made by reactive sputtering, the stoichiometric phase has a golden lustre [1] becoming more silvery as the nitrogen content is reduced. This is achieved by controlling the nitrogen partial pressure in the sputtering chamber. We demonstrate this in Figures 1a and 2a where the colour coordinates and compositions of a series of sputtered films are shown. In previous work [2], HfN_x films made by reactive ion plating over a range of deposition rates were found to be of constant composition. It is thus surprising that the colour should vary concurrently from a golden yellow with a red cast to a silvery yellow with a green cast (Figure 1a), and must be due to factors other than the nitrogen content. In the present work, we attribute the colour of the films to the location and steepness of the plasma reflection edge.

2. Results and Discussion

Both series of films show variations in lattice parameter and distortion and in film texture (Figure 2). In the sputtered films the texture changes from random to strongly (111) with increasing nitrogen content whilst in the ion plated films it changes from mixed (111)-(311) to (311) with increasing deposition rate. Concurrently the parameters of the expanded and distorted lattices fall, but remain well above the stoichiometric value.

We consider an ionic model where charge transfer from hafnium to nitrogen is expected to leave about one conduction electron per formula unit. Assuming no interband transitions and an effective mass equal to the free electron mass, a plasma frequency of 7.7 eV can be calculated. Measurements shown in Figure 1b of the reflectivity of a typical film (circled in Figure 1a) indicate that the plasma frequency is shifted to about 2.8 eV by interband transitions. The film is yellow because of the strong depression of the reflectivity at the

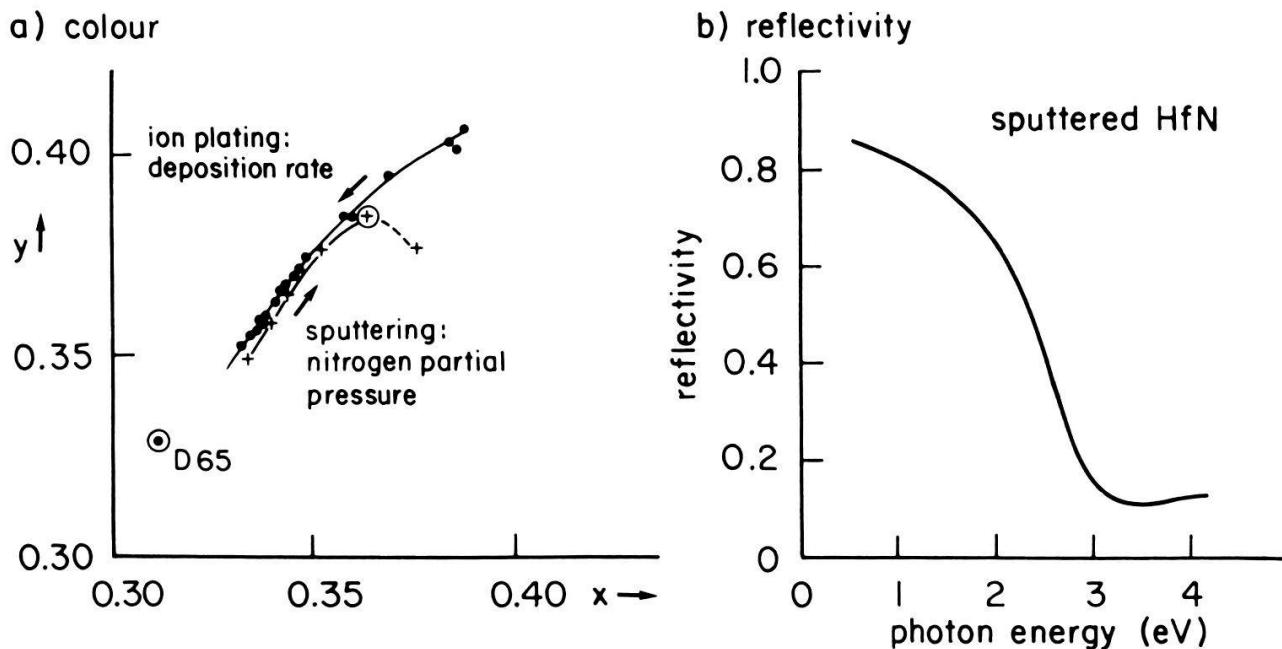


Figure 1 a) the colour coordinates of sputtered and ion plated HfN films and
b) the reflectivity of the sputtered film circled in a).

blue end of the spectrum. The qualitative consequences of the model are now discussed in terms of the variation of the plasma frequency with the free carrier concentration:

- reducing the nitrogen content x in HfN_x at constant lattice volume reduces the transferable charge on the metal ions, shifting the plasma edge to higher frequencies (i.e. towards the blue) making the colour more silvery.
- expanding the lattice at a given nitrogen content reduces the charge per unit volume and moves the plasma edge to lower frequencies causing a colour shift towards the red end of the spectrum and making the colour more yellow.
- distorting the lattice from the cubic NaCl structure makes the location of the plasma edge a function of the crystal orientation, as in e.g. hexagonal crystals [3]. The direction of the greatest increase in lattice parameter is also the direction in which the greatest shift towards the red should be observed, from b).
- the texture of the film can influence the colour if the crystal lattice is distorted. The observed colour is then that appropriate to the particular $[xyz]$ lattice direction because the surface of the film is composed of (xyz) planes which are perpendicular to the $[xyz]$ direction in cubic crystals.

The model can now be compared with the experimental data to study the effects of nitrogen content, lattice parameter and distortion and film texture on the measured colour coordinates. For convenience we consider four regimes:

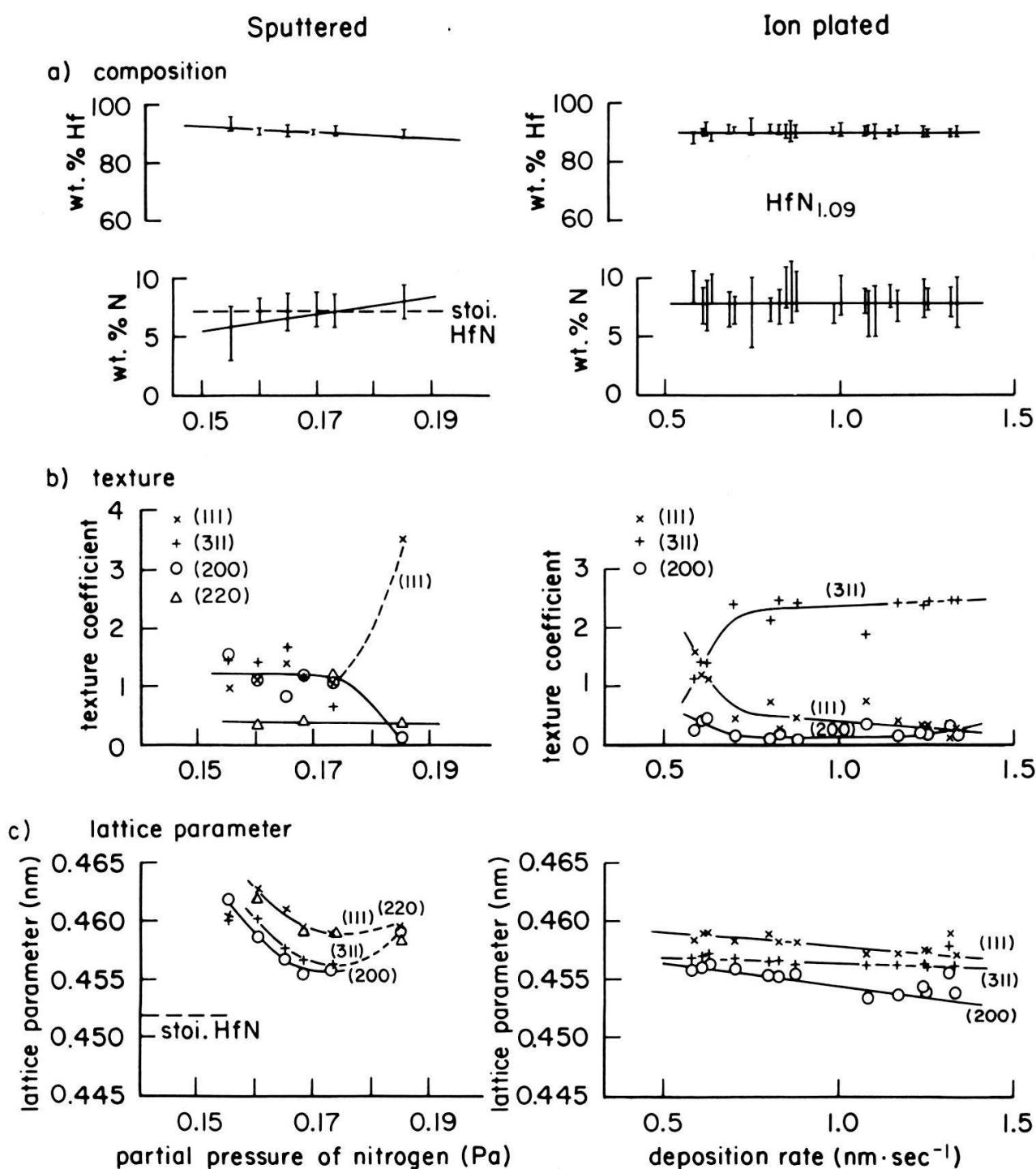


Figure 2 compositions, textures and lattice parameters of HfN films.

- in ion plated films made at higher deposition rates, only the lattice volume changes. It increases as the deposition rate is decreased which leads to a deepening of the yellow hue (point b), as observed.
- in ion plated films made at the lowest deposition rates, the texture changes steadily from (311) towards a mixed (111)-(311) as the deposition rate is reduced. The lattice parameter in the (111) plane is greater than in

the (311) plane, so this implies a net increase in lattice volume in the [111] direction. There is thus a steadily greater reduction in carrier concentration so that the colour shifts more rapidly towards the red (points b-d).

iii) the sputtered films made at low partial pressures are randomly oriented. As the partial pressure is increased, the nitrogen content in the films increases which should cause a shift to the red (point a) whereas the lattice volume falls which should have the opposite effect (point b). A comparison of these effects on the free plasma energy in the ionic model shows the effect of composition to dominate strongly. The net change is thus a decrease in the charge concentration so that an increase in yellowness occurs.

iv) the sputtered film made at a partial pressure of 0.185 Pa has an increased lattice volume compared with the film made at a partial pressure of 0.173 Pa. The strong (111) texture should have no significance as the lattice is not distorted (point d). The nitrogen content is markedly higher than in the film made at 0.16 Pa which has about the same lattice volume. The net decrease in charge carrier concentration should move the plasma edge to give the observed enhanced golden yellow colour.

3. Conclusions

The colour variations found in HfN_x films made by reactive sputtering or ion plating result from differences in the nitrogen content, lattice parameters and distortion and film texture. The effects can be understood qualitatively using an ionic model where interband transitions cause the plasma frequency to occur at about 2.8 eV in the blue and hence a net yellow colour results. The effects of the composition and lattice properties is to move the plasma reflection edge to higher (more silvery) or lower (more red) photon energies.

4. References

- [1] W.D. Sproul, Thin Solid Films 118, 279 (1984).
- [2] A.J. Perry, L. Simmen and L. Chollet, Thin Solid Films 118, 271 (1984).
- [3] J. Schoenes and J.J.M. Franse, Physica B to be published.

* Visiting Scientist.

High resolution submillimeter spectroscopy of N₂O and CH₃Br⁸¹.

S.A. Salito and R. Behn

Centre de Recherches en Physique des Plasmas, Association Euratom-Confédération Suisse, EPFL - 1007 Lausanne / Switzerland

H.P. Röser, R. Nowak and members of the submillimeter division
MPI für Radioastronomie, D - 5300 Bonn

A submillimeter heterodyne receiver combined with an acousto-optical spectrometer has been used to measure molecular absorption by rotational transitions near 779 GHz. The spectral resolution is about $\Delta\nu/\nu = 3 \cdot 10^{-7}$ and allows to measure the line shape of a rotational transition. For the molecules of N₂O and CH₃Br⁸¹ the peak absorption coefficient and the line width parameter have been measured for particular J-K levels. These experimental results are compared with calculations using known molecular parameters. They form the basis for the design of high rejection filters in the FIR.

Erste Ergebnisse zur Kollektiven Thomson-Streuung an einem Tokamak Plasma mit Hilfe eines D₂O Ferninfrarot Lasers.

R. Behn, M.A. Dupertuis, I. Kjelberg, P. Krug, A. Salito, M. Siegrist
Centre de Recherches en Physique des Plasmas, Association Euratom-Confédération Suisse, EPFL - 1007 Lausanne / Switzerland

Die Thomson-Streuung im fernen Infrarot soll es ermöglichen, die Ionentemperatur eines Tokamak Plasmas mit sehr guter räumlicher und zeitlicher Auflösung zu bestimmen. Für dieses Messverfahren wird außer einem leistungsstarken Ferninfrarot Laser ein empfindliches breitbandiges Empfangssystem benötigt. Mit einem D₂O Laser ($\lambda=385 \mu\text{m}$; $P=150 \text{ kW}$; $\tau=1 \mu\text{s}$) und einem Heterodynempfänger mit einer Schottky Diode als Mischer ($\text{NEP}=2 \cdot 10^{-18} \text{ W/Hz}$) ist es uns erstmals gelungen von einem Tokamak Plasma erzeugtes Streulicht nachzuweisen.

Influence de la forme du résonateur sur les caractéristiques d'un gyrotron quasi-optique.

A. Perrenoud et M.Q. Tran

Centre de Recherches en Physique des Plasmas, Association Euratom-Confédération Suisse, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, 21, av. des Bains - 1007 Lausanne / Switzerland

Cette étude s'inscrit dans le cadre de la construction d'un gyrotron de haute puissance (200 kW, 120 GHz) entreprise au CRPP. Les résonateurs quasi-optiques confocaux rayonnent également autour de chaque miroir. Il faut donc utiliser des résonateurs non confocaux pour optimiser la puissance de sortie d'un côté. Les contraintes techniques dues aux pertes ohmiques dans les miroirs sont présentées. L'influence de la forme du champ électromagnétique du résonateur sur le courant d'accrochage du gyrotron et son efficacité sont discutées.

A novel hybrid ISS/AES depth profiling system

E. Gisler*, E.B. Bas, Institut für angewandte Physik, ETHZ, CH-8093 Zürich
*present address: Institut für Physik der Universität Basel, CH-4056 Basel

The newly developed hybrid electron-ion gun allows bombardment of the sample surface from the same direction with ions as well as electrons. By integrating such a hybrid gun axially in a CMA it is possible to switch electrically between AES, ISS and sputtering mode. The gun delivers typically $-20\mu\text{A}$ for AES, $+40\text{nA}$ for ISS and $+1.2\mu\text{A}$ for sputtering. This compact system is best suited for automatically controlled depth profile analysis. The option to work with gas mixtures in order to optimize high sputtering yields and the possibility to detect light elements with ISS is shown with $\text{Ar}^+\text{-He}^+$ on an $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-Al}$ interface.

Modellberechnung für die Peakform und das Massenauflösungsvermögen in Ionenstreuungs-Spektren (ISS) im Vergleich mit experimentellen Resultaten

E. Gisler*, E.B. Bas, Institut für angewandte Physik, ETHZ, 8093 Zürich
*z.Zt.: Institut für Physik, Universität Basel, Klingelbergstr.82, 4056 Basel

Das Modell der binären Ion-Atom-Streuung (binary collision approximation, BCA) erlaubt die Berechnung von Position, Form und Breite eines monoisotopen ISS-Peaks auf der Energieskala. Bei elastischer Streuung mit festem Winkel folgt die Position eindeutig aus der Targetmasse (BCA-Relation). Form und Breite des Peaks erhält man näherungsweise durch Faltung der folgenden Effekte. Die Primärenergieverteilung und die Analysatorresponse werden durch Gaussfunktionen angenähert. Der Analysator-Akzeptanzwinkel und der Primärstrahl-Öffnungswinkel werden durch Rechteckfunktionen erfasst. So ergibt sich die instrumentell bestmögliche Peakform. Inelastische Energieverluste werden durch Faltung mit einer asymmetrischen Verlustfunktion berücksichtigt. Diese bewirkt neben einer Verbreiterung auch eine Verschiebung des Peaks. Damit erfasst das Modell auch die experimentell gefundene Korrelation zwischen Peakbreite und Peakverschiebung. Die experimentelle Peakbreite und damit auch das Auflösungsvermögen ist um etwa einen Faktor 1.4 bis 3 schlechter als die rein instrumentellen Modellwerte.

ANDO IX : Andere Domänen

RESONATEURS EN QUARTZ : MODELISATION PAR ELEMENTS FINIS

Hugues Vuillème, ASULAB S.A., Passage Max-Meuron 6, CH-2001 Neuchâtel

Résumé: Calcul de fréquences propres et déformées de structures à 2 et 3 dimensions par la méthode des éléments finis. Etude des modes de vibrations transversaux, longitudinaux et de torsion (3 dim.). Comparaison des résultats avec ceux obtenus analytiquement pour le barreau encastré-libre (cantilever).

Introduction: L'étude analytique de structures quelconques vibrant sans contraintes extérieures n'aboutit à un résultat que pour certaines géométries simples (ex: cantilever). Par contre, la méthode des éléments finis résout la plupart des problèmes sans restriction sur la forme des objets; mais il faut au préalable s'assurer de la validité des calculs. La théorie de Timoshenko sur les barreaux appliquée au cantilever nous servira pour la comparaison des modes transversaux. Ensuite, nous présentons le cas d'un résonateur d'allongement vibrant à une fréquence de 775 kHz (voir fig. 10).

1. Formulation théorique: a) Méthode des éléments finis:

Partant de l'équation du mouvement classique $F=ma$ (F =force, m =masse, a =accélération), nous aboutissons par la méthode de Galerkin à l'équation (stationnaire) aux valeurs et vecteurs propres (fréquences et déplacements) suivante [1] :

$[K - \omega^2 M] \vec{X} = \vec{0}$ avec: K = matrice des rigidités, M = matrice de masse, ω = valeur propre (fréquence circulaire propre), \vec{X} = vecteur propre (déplacements). La taille des matrices et des vecteurs dépend directement du nombre des degrés de liberté considérés. Nous résolvons cette équation matricielle en cherchant le mode fondamental et/ou les harmoniques de fréquences supérieures. Maillages: - 2 D: triangles, interpolation quadratique des déplacements. - 3 D: pentaèdres (prismes droits), interpolation linéaire.

Remarque: les programmes utilisés proviennent du Club MODULEF de l'Institut National de Recherche en Informatique et Automatique (INRIA) en France.

b) Vibrations longitudinales: Formulation analytique classique [2] ;

équation du mouvement: $E_A \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$ avec: u = déplacement longitudinal,

E_A = module d'élasticité longitudinal, ρ = densité, x = axe dirigé selon la longueur du barreau, t = temps, qui conduit, pour un cantilever de longueur l aux fréquences suivantes: $f_{L,n} = \frac{(2n-1)}{4l} \sqrt{\frac{E_A}{\rho}}$ pour les modes $n=1, 2, 3, \dots$

c) Vibrations transversales: Théorie de Timoshenko [3] tenant compte de l'inertie de rotation et des forces de cisaillement;

équation du mouvement: $\frac{E I}{\mu} \frac{\partial^4 y}{\partial x^4} + \frac{\partial^2 y}{\partial t^2} - r^2 \left(1 + \frac{E}{kG}\right) \frac{\partial^4 y}{\partial x^2 \partial t^2} + r^2 \frac{\mu}{kSG} \frac{\partial^4 y}{\partial t^4} = 0$

où: E = module d'Young, G = module de cisaillement, S = surface de la section du barreau perpendiculaire à x , I = moment d'inertie de la section, r = rayon de gyration, k = constante dépendant de la forme de la section (section rectangulaire: $k = 5/6$), x = axe dirigé selon la longueur du barreau, y = déplacement transversal du barreau, μ = masse linéaire.

Remarque: si l'on ne considère que les 2 premiers termes soulignés de la relation ci-dessus, on retrouve l'équation classique.

La solution générale s'écrit: $y(x,t) = X(x) \cos(\omega_n t + \phi)$

avec: $X(x) = C_1 \cosh \frac{\alpha x}{l} + C_2 \sinh \frac{\alpha x}{l} + C_3 \cos \frac{\beta x}{l} + C_4 \sin \frac{\beta x}{l}$

et:
$$\begin{cases} \alpha^2 \\ \beta^2 \end{cases} = \frac{\omega^2 l^2 \rho}{2E} \left[\pm \left(1 + \frac{E}{kG} \right) + \sqrt{\left(1 - \frac{E}{kG} \right)^2 + \frac{4E}{\omega^2 \rho}} \right]$$
 voir réf. 4 p. 61-15

En tenant compte des conditions aux limites (encastrement), l'équation pour

les fréquences s'écrit : $2 + \frac{\alpha^2 - \beta^2}{\alpha \beta} \sinh \alpha \sin \beta + \left(\frac{\beta^2 - \rho^2}{\alpha^2 + \rho^2} + \frac{\alpha^2 + \rho^2}{\beta^2 - \rho^2} \right) \cosh \alpha \cos \beta = 0$

où: $\rho^2 = \frac{\omega^2 l^2 \rho}{E}$

Utilisons les abaques tracées par J.G. Sutherland et L.E. Goodman (réf. 3, fig. 7.8) pour les modes n de 1 à 6 (voir fig. 1).

Remarque: 1) $f_{C,n} = \frac{A_n}{2\pi l^2} \sqrt{\frac{EI}{\mu}}$, A_n tabulés, $A_1 = 3.52$ [5].

- 2) Ces courbes sont calculées pour un cantilever dont le rapport E/kG vaut 3.20. Dans notre exemple ci-après, $E/kG = 2.76$. Puisque la correction sur chaque fréquence augmente quand ce rapport croît (voir réf. 3, fig. 7.7), il ne faudra pas s'étonner de l'écart entre les fréquences déterminées par la méthode des éléments finis et celles obtenues à l'aide des abaques (fig. 1).
 3) La théorie de Timoshenko ne décrit que partiellement le phénomène.

2. Exemple: barreau encastré-libre à 2 et 3 dimensions, $10 \times 1 \times 1$ mm.

A 2 dimensions, notre analyse porte sur le comportement du résonateur en contraintes planes parallèlement au plan du barreau. Le quartz est considéré comme un corps aux propriétés isotropes: module d'Young=8.07x10¹⁰ N/m², nombre de Poisson=0.15, densité=2.65x10³ kg/m³; valeurs approximatives du quartz de coupe Z (orientation de la longueur des résonateurs = direction cristallographique Y). Les résultats des calculs (2106 degrés de libertés) sont présentés dans les figures 2 à 7. Le graphique suivant (fig. 8) montre la convergence de la méthode en fonction du nombre n des points pour le premier mode. A partir de 300 points, la valeur propre ne change que très peu.

Modes d'allongement: les valeurs ne changent au plus que de 0.1% en passant de 63 à 1053 points pour le maillage. Cette stabilité des modes d'allongements peut perturber le classement par ordre croissant de tous les modes (transversaux et longitudinaux). Exemple: mode 2 d'allongement et mode 5 transversal presque identiques avec un maillage de 63 points (différence de 0.2%) alors qu'ils se distinguent mieux avec 1053 points (5%).

Tableau des 3 premiers modes longitudinaux:

Mode	f_L [kHz]	f_E [kHz]	écart	$\text{écart} = f_E - f_L / f_L$
1	138.0	138.01	< 0.1 %	
2	413.9	413.95	< 0.1 %	
3	689.8	689.67	< 0.1 %	

Ces résultats valident la méthode des éléments finis appliqués aux vibrations libres des structures, aussi complexes soient-elles; car il faut relativiser les comparaisons avec la théorie de Timoshenko (voir remarque 2).

3 dimensions: tableau récapitulatif

modes transversaux		modes longitudinaux		modes de torsions
3 D. [kHz]	2 D. [kHz]	3 D. [kHz]	2 D. [kHz]	3 dimensions [kHz]
9.39	8.85	133.5	138.0	89.7
56.8	53.3	400.0	413.9	269.1
150.5	141.0	665.2	689.8	448.3
274.3	257.3			627.4
418.4	394.0			
575.8	544.4			

Un calcul analytique des modes de torsions [6] donne pour le mode fondamental une fréquence ($f=90\text{kHz}$) très proche de la valeur obtenue par éléments finis.

3. Exemple de structure étudiée: résonateur d'allongement (2 D. v. fig. 9 à 12). Le mode longitudinal du barreau (hachuré sur fig. 10) ne transmet que peu de mouvement au reste du résonateur. Les modes voisins se distinguent suffisamment de celui d'allongement (-10% et +17%) pour ne pas le perturber.

En conclusions, puisque cette méthode de détermination des modes de contours et des fréquences propres donne d'excellents résultats, son application à des structures complexes élargira la gamme des résonateurs réalisables.

Remerciements: Je tiens à remercier spécialement MM. W. Zingg et M. Christen pour les discussions fructueuses que nous avons eues ensemble.

Références:

- [1] ZIENKIEWICZ,O.C. The Finite Element Method. 3rd ed., Mc Graw-Hill, p. 545
- [2] BISHOP,R.E.D. and JOHNSON,C.D. The Mechanics of Vibration. Cambridge University Press, p. 277
- [3] HARRIS,C.M. and CREDE,C.E. Shock and Vibration Handbook. Sec. ed., Mc Graw-Hill, p. 7-17
- [4] FLUEGGE,W. Handbook of Engineering Mechanics. Mc Graw-Hill
- [5] ROARK,R.J. and YOUNG,W.C. Formulas for Stress and Strain. 5th ed., Mc Graw-Hill, p. 576
- [6] HERMANN,J. DT-cut Torsional Resonators. Proceedings of the 31th annual Symposium on Frequency Control, June 1977, p. 55

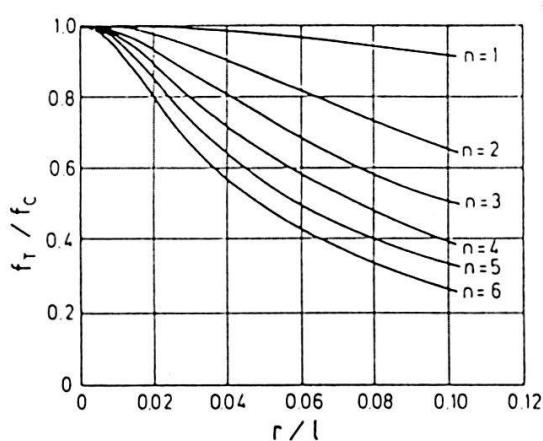


Fig. 1 Ecart en fréquence des 6 premiers modes

Légendes :

f_T = fréquence corrigée pour le cisaillement et la rotation (fréquence de Timoshenko)
 f_C = fréquence résultant de l'équation classique
 r = rayon de gyration de la section
 l = longueur du barreau

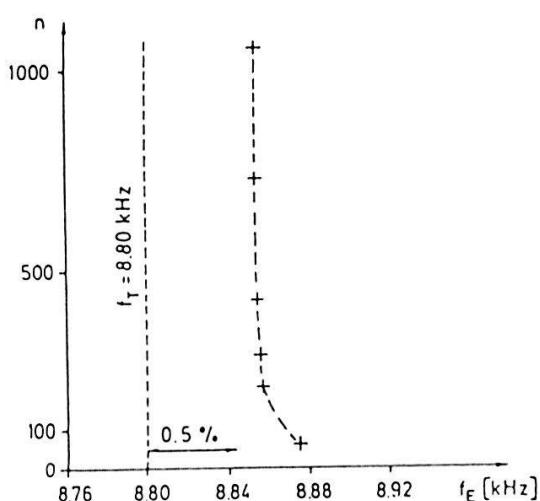


Fig. 8 MODE 1

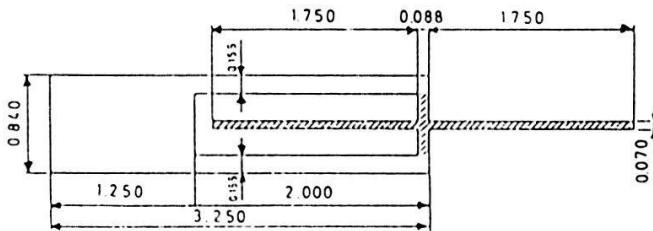
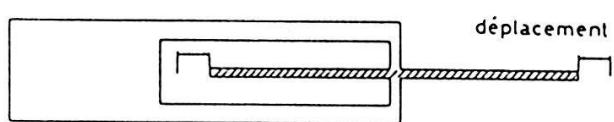
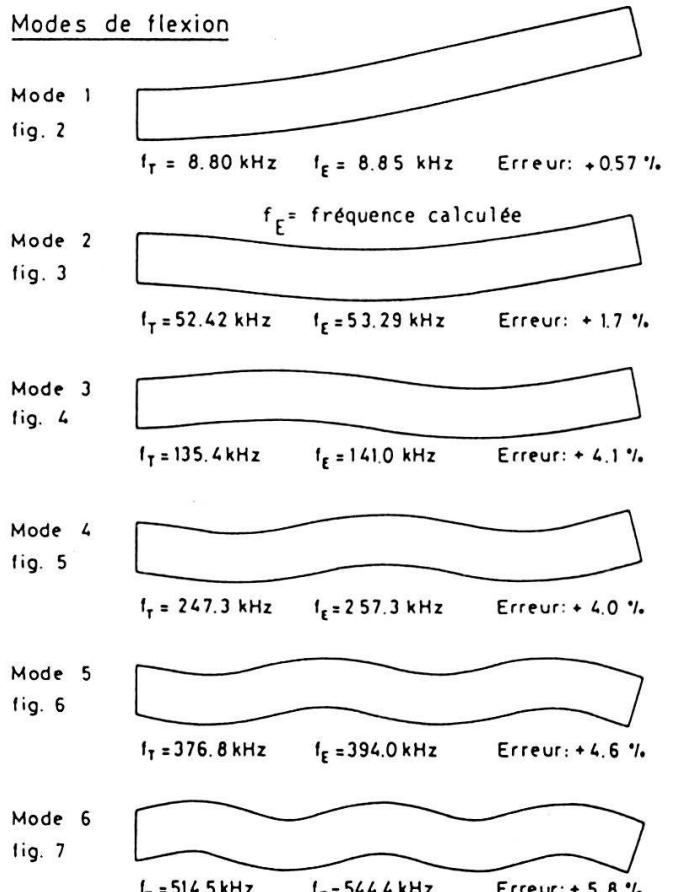
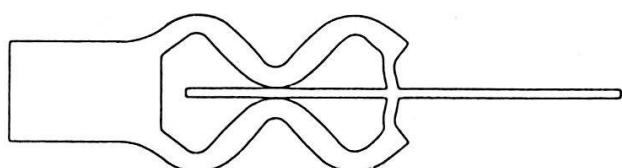


Fig. 9 Résonateur d'allongement


 Fig. 10 Mode d'allongement (premier mode): $f = 775$ kHz

les 2 fréquences propres les plus proches


 Fig. 11 17ème mode transversal : $f = 694.7$ kHz

 Fig. 12 18ème mode transversal : $f = 914.2$ kHz

EINBLICK IN URZUSTAND, DYNAMIK UND BIOMENTALE STRUKTUR DES UNIVERSUMS

J.T. Muheim, Lab. für Festkörperphysik ETHZ, Hönggerberg, 8093 Zürich

Auszug: Aus einer s-r-Abbildungsvariante wird auf 2 gigantische Geschwindigkeiten geschlossen ("kleine" und "grosse" Kohärenzwelle:KKW,GKW). $t_{P1} = 5.39 \times 10^{-44}$ s nach dem Urknall vor 12.7 Milliarden Jahren liegt die materiale Masse $M_u = 1.854 \times 10^{52}$ kg offenbar als "geordneter Molekulkristall" vor, wobei jeder Gitterpunkt durch einen Planckrotator besetzt ist, seinerseits eingebettet in einen See von "Planckphotonen". Nach t_{P1} , wenn die Lichtwelt erst den Comptonraum von M_{P1} sieht, erfassen KKW bereits jenen des bottom-Quarks und GKW jenen der DNS. Auf die Degradation von M_{P1} zu Elementarteilchen erfolgt Komposition bis zum "Zellkern" $R_o = 2.746 \mu$, d.h. nach $t_o = R_o / c$ haben KKW den Raum maximaler Gehirnkohärenz und GKW jenen des gravitativuniversalen Flecks R_F erreicht. Daraus folgt, dass das ganze spätere Universum bereits in der Urkugel R_o vollumfänglich konzipiert ist. c- und GKW-Welt sind streng parallel gebaut. Wegen M_u endlich, endet die GKW-Welt auf der Stufe des Neurons.

Einführung

Aus Platzgründen müssen alle in früheren Arbeiten [la-h] eingeführten Größen als bekannt vorausgesetzt werden, und können im folgenden die Ergebnisse nur summarisch skizziert werden. Das erweiterte Parametermodell ist Teil einer allgemeinen Wechselwirkungs (WW)-Kosmologie. Da neben den Haupt- und (vorläufig bekannten) Neben-WW unendlich viele (Kontinuums-) WW eingehen, ist die Zahl der Parameter immens und im Prinzip unendlich. Der gegenwärtige Kenntnisstand des als gültig angenommenen Relationensystem-Modells basiert auf 4 als bekannt vorausgesetzten Elementarkonstanten: \hbar, c, G und k_B . Dies ist möglicherweise die Minimalbasis. Die Wahl ist in dem Sinne willkürlich als diese Konstanten keineswegs fundamentaler sind als etwa die elektromagnetische Ladung e_s , die gravitative Hubble-Konstante H_g , das Photon/Nukleonverhältnis S_γ , oder die materiale Gesamtbaryonenmasse M_u etc., die alle aus dem Modell hervorgehen. Sie sind bloss naheliegender weil leichter beobachtbar. Das kohärente, von S_γ regierte Fleckgeschehen ist wahrscheinlich das fundamentalste dynamische Element der WW-Kosmologie: es liegt jeder Art von Re-

zession, d.h. Raum-Zeit-Materie-Geschehen zugrunde. Es regiert aber auch die Kohärenzwellen, deren Geschwindigkeiten annähernd durch eine S_γ -Potenz mit c verknüpft sind. Das vorliegende Modell bestätigt die Mutmassungen des "anthropischen Modells" [2]. Aus dem bisherigen Verständnis wird geschlossen, dass Leben und Bewusstsein natürliche (biamentale) Aspekte des Universums sind und dass sie, wo und wann immer sich manifestierend, sich an die Naturgesetzmäßigkeit halten. Die Seins- und Warum-Frage hingegen entzieht sich der Naturwissenschaft. Die Frage, warum es vor 12.7 Milliarden Jahren einen Urknall oder Schöpfungsakt gegeben hat, ist physikalisch nicht sinnvoll, wohl aber die Frage nach Modus und Ablauf. Wir beschränken uns im folgenden auf die knappe Charakterisierung einiger ausgezeichneter Momente extrem kurz nach dem Urknall.

Nahe am Urknall

Wie sieht nun das Modell den Urknall? Wie nahe auch das Modell an den zeitlichen Ereignisnullpunkt heranreicht, scheint das Universum immer mit c zu expandieren und von H_g beherrscht zu sein. D.h. das Modell sieht immer Rezession und nie stationären Zustand. Rezession ist dabei zu verstehen als Superposition von radialer Expansion und azimutaler Zirkulation. Letztere ist bedingt durch die Drehimpulsquantisierung $\hbar/2$. Sie ist mit H_g verknüpft durch $\omega_g = (2\pi H_g) (mR_g^2) = \hbar/2$. Das gravitative Trägheitsmomentquantum beträgt $\theta_g = (mR_g^2) = \hbar/4\pi H_g = 4.935 \times 10^{-18} \text{ kgm}^2$ und genügt ∞ vielen Paaren (m, R) . $\omega_g = 1.068 \times 10^{-17} \text{ s}^{-1}$ kann einerseits als Larmorkreisfrequenz interpretiert werden und hat andererseits eine einfache wirbeltheoretische Deutung. Das eigentliche Paradox des Urzustands liegt nun darin, dass die Weltsphäre den Urradius $R_0 = 2.746 \times 10^{-6} \text{ m}$ nie unterschreitet und trotzdem mit dem Radius $R(t)$ singulär von Null beginnt, d.h. das Universum beginnt singulär ohne je singulär zu sein. Formal liesse sich argumentieren, dass die R_0 -Sphäre für t im Intervall $0 < t < t_0 = R_0/c = 9.159 \times 10^{-15} \text{ s}$ zwar existiert, aber erst allmählich durch eine im "Zentrum" startende Lichtfront erhellt wird. Diese Deutung ist aber unbefriedigend, da jeder Punkt der R_0 -Sphäre Zentrum ist. Das Universum ist also zur Zeit t an jedem Punkt $R(t)$ gross, aber weil zusammenhängend auch R_0 . Ueberdies scheint die konstante materiale Gesamtmasse $M_u = N_u m_H = (N_u/2\zeta_g) (2M_{Pl}) = 1.854 \times 10^{52} \text{ kg}$ für $t < t_0$ auf $N_u/2\zeta_g = 4.261 \times 10^{59}$ Gitterpunkte verteilt als Kerne riesiger nichtma-

terialer Energieballen, eingebettet in einen See von $2S_{\gamma g} = 2.533 \times 10^{28}$ Photonen/Gitterpunkt. Wir nennen die einem Planckmassenpaar/Gitterpunkt zugeordnete photonische Region eine Lichtzelle. Das Universum ist, sobald es existiert, von höchster Ordnung und nie chaotisch. Es ist aber möglicherweise imperfect in dem Sinne wie auch ein realer Festkörper imperfect ist.

4 ausgezeichnete Frühzeiten

$$(i) (R_{Pl}/f_g)/v_{GKW} = 1.0 \times 10^{-100} \text{ s}$$

Die derzeit kleinste, physikalisch gesicherte Zeitspanne beträgt 10^{-100} s . Sie entspricht der Durchlaufzeit der grossen Kohärenzwelle auf der Wellenlänge des Planck-Universums R_{Pl} mit $v_{GKW} = (a_b/a_s)c = 3.074 \times 10^{27} c = 9.216 \times 10^{35} \text{ ms}^{-1}$. Der Radius des Universums beträgt zu dieser Zeit $2.997 \times 10^{-92} \text{ m}$.

$$(ii) t_{Pl} = R_{Pl}/c = \sqrt{\frac{M}{5}} = 5.390 \times 10^{-44} \text{ s}$$

Zur Planckzeit t_{Pl} hat die Lichtwelt überall in R_o den Comptonraum von M_{Pl} erhellte. Die gitterverteilte materiale Gesamtmasse M_u ist um R_{Pl} aus dem lokalen Ursprung entfernt und unterliegt als ganze der Spinquantisierung, weshalb $m = \theta_g / R_{Pl}^2 = 1.889 \times 10^{52} \text{ kg} \cong M_u = 1.854 \times 10^{52} \text{ kg}$ ist. Die Masse eines Photons (heutige "3K"-Strahlung) beträgt $f_g M_{Pl} = 3.776 \times 10^{21} \text{ kg} \cong 1/20$ Mondmasse, bei der Strahlungstemperatur $T(t_{Pl}) = z/R_{Pl} = 3.111 \times 10^{61} \text{ K}$. Die Masse des formalen Bosons ist $m_{x,g}(t_{Pl}) = 1.149 \times 10^{51} \text{ kg} = M_u / 16.12$ und steht in fixem Verhältnis zu der mit der Trägheitsmomentmasse m identischen Wirbelfadenmasse. Das Boson gehört zu einer Bose-Einstein-Kondensation mit der fixen Quantentemperatur $T_{BE} = 1.670 \times 10^{32} \text{ K} \cong T_{Pl} = M_{Pl} c^2 / k_B = 1.416 \times 10^{32} \text{ K}$.

$$(iii) t_{J1} = R_{J1}/c = 1.908 \times 10^{-42} \text{ s} \cong (2\pi)^2 t_{Pl}$$

Nach ca. $(2\pi)^2 t_{Pl}$ hat die strahlungsdominierte Innenenergie nachgelassen und es findet ein erstes Mal ein Fleck-Jeans-Massen ($M_{F,J}$)-Uebergang statt zu einem materiedominierten Regime. Der zweite Uebergang dieser Art erfolgt später beim Radius $R_F = 2\pi R_H = 2.36 \times 10^7 L_j$ [la-h]. Die θ_g -Quantisierung erfasst nun nur noch eine Lichtzelle: $m = \theta_g / R_{J1}^2 = 1.508 \times 10^{49} \text{ kg} \cong 2S_{\gamma g} (h/\lambda_{J1} c) = 1.698 \times 10^{49} \text{ kg} = M_{F,J}$. Aus diesem Faktum wird geschlossen, dass die Photonen sich in $t(t_o)$ "massiv" verhalten, und gemäss Parametermodell gravitativ wechselwirken. R_{J1} ist aus 2 Gründen hochausgezeichnet: a) die Photonen einer Lichtzelle erfüllen mit ihren Wellenlängen λ_{J1} auf dem Planckkreisumfang die "Stehende-Wellen-Beding-

gung": $2S \zeta g J_1 = 2\pi R_{Pl} = U_{Pl}$. b) Der Weltumfang erfüllt hinsichtlich R_{Pl} annähernd die $(2\pi)^3$ -Bedingung: $R_{J1} = \lambda_{J1} f_g \cong (2\pi)^2 R_{Pl}$ und $U_{J1} = 2\pi R_{J1} \cong (2\pi)^3 R_{Pl}$.

Diese Bedingung ist in ungezählten physikalischen und biologischen Fällen wichtig.

$$(iv) t_o = R_o / c = 9.159 \times 10^{-15} \text{ s}$$

Die Lichtfront hat jetzt die ganze Ursphäre erhellt. Die Strahlung, deren Temperatur auf T_{BE} gesunken ist, besteht aus normalen Planckphotonen $\lambda(R_o) = R_{Pl}$, deren Ruhemasse für alle Zukunft exakt Null ist in Einklang mit der Magnetflussquantisierung $\emptyset_o = h/2e_s$. Dem formalen Boson entspricht nun ein regulärer Planckmassenrotator: $m_{x,i}(R_o) = 3.984 \times 10^{-8} \text{ kg} = 1.830 M_{Pl}$, und $m_y(R_o) = 6.539 \times 10^{-33} \text{ kg} \cong m_w = \alpha_s m_e = 6.647 \times 10^{-33} \text{ kg}$. m_w und damit α_w , sind zentral für Gehirn und mentale Struktur (Telepathie, Aura, Wünschelrute). Nicht zufällig ist $\theta_g/m_w = 2.724 \times 10^7 \text{ m} \cong \lambda_{\alpha\text{-Rhyth.}}$ gleich der Wellenlänge des Gehirn- α -Rhythmus. An $m_{x,i}(R_o)$ schliessen ausnahmslos hochausgezeichnete Quantenmassen an.

c/KW-Parallelismus

Die Kohärenzwellen spielen möglicherweise auch die Rolle von Bewusstseinswellen. Zwischen c-Welt und KW-Welten zeichnet sich ein grandioser Parallelismus ab. Von besonderem Interesse ist der c/GKW-Parallelismus. Nicht nur haben die c-Welt-Etappen, angefangen von der Plancklänge R_{Pl} bis zur Dimension der reifen Eizelle $s_{g,o}$, ihre perfekte grossdimensionale Entsprechung (z.B. erscheint die Spiralgalaxie als eine in der Ebene angeordnete riesige Doppelhelix), sondern ist auch innerhalb einer einzelnen Entsprechung in wechselwirkungsmässiger Form die Absicht zur Erzeugung von geisterfülltem Leben klar nachweisbar. Das Modell zeigt, dass sich die Schöpfung schon nach 10^{-100} s über den Ablauf im Reinen war.

Literatur

- [1a-h] J.T. Muheim, Helv. Phys. Acta a) 54, 281 (1981); b) 54, 596 (1981); c) 55, 568 (1982); d) 56, 922 (1983); e) 56, 925 (1983); f) 57, 221 (1984); g) 57, 533 (1984); h) 58, (1985).
- [2] B.J. Carr and M.J. Rees, Nature 278, 605 (1979).

ANDO X : Plasmaphysik II

**ANALYTICAL SOLUTION OF THE HYDRODYNAMICAL PROBLEM OF EXPANSION OF
A THIN PLANE TARGET IRRADIATED BY AN INTENSIVE ION BEAM**

Yu.S. Sayasov, Institute of Physics, University of Fribourg, CH-1700 Fribourg Switzerland

Processes of interaction of intensive ion beams with plane targets are being investigated now experimentally in many laboratories. The aim of this paper is to indicate that the gasdynamical problem of expansion of such plane targets (e.g. of a thin metal foil), irradiated by an intensive beam of ions having range exceeding width of the foil allows a rigorous analytical solution of the type discussed long ago by L.I. Sedov [1], [2]. As it was shown by Sedov, the hydrodynamical equations

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad \rho \frac{Du}{Dt} = - \frac{\partial p}{\partial x}, \quad \frac{p}{\gamma-1} \frac{Ds}{Dt} = 0, \quad \frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x}, \quad S = \ln \frac{p}{\rho^\gamma} \quad (1)$$

describing a one-dimensional adiabatic motion of a compressible gas, governed by the ideal gas equation of state (EOS), allow a solution of the type

$$\rho = - \mu(t) \frac{dF}{d\xi}, \quad p = \phi(t)F(\xi), \quad u = - (d\ln\mu/dt)x, \quad (2)$$

$F(\xi)$ being an arbitrary function of the dimensionless variable $\xi = \mu^2(t)x^2$. Here x is an appropriate spatial coordinate, t is the time, γ is an adiabaticity index; ρ, p, u are resp. mass-density, pressure and velocity of the gas. (It must be noted that (2) represents a simplification of the Sedov's solution corresponding to the values $s = 0, v = 1$ of the numerical parameters entering into his formulas).

We will try now to generalise the Sedov's solution introducing in the energy conservation equation the energy source term $Q \text{erg/cm}^3 \text{sec}$ representing energy deposition in the foil by an intensive ion beam, i.e. the equation takes the form $(p/(\gamma-1))(DS/Dt) = Q$ (see e.g. [3], p. 275). This form of the energy conservation equation implies that ionisation processes in the plasma arising as a result of heating of the foil by an ion beam have equilibrium charac-

ter. Otherwise, it would be necessary to introduce in this equation a term of the type $-I(Dn_e/Dt)$, (n_e is the plasma electron density, I is an ionisation energy). Assuming that velocity v_p of the projectile ions exceeds velocities of the bound and plasma electrons we can represent Q in the form

$$Q = \frac{4\pi z_p^2 e^4 n \ln \Lambda}{m_e v_p^2} j_0(t)$$

where j_0 is the projectile ion current density which can be time-dependent, z_p is the projectile ion charge, n is total density of electrons (bound and free), $\ln \Lambda$ is a Coulomb logarithm. Neglecting relatively unimportant difference between bound and free electrons we can express the total electron density n by the mass density ρ as follows: $n = z_a \rho / m_a$ where m_a , z_a are mass and charge of the target nuclei. (The target is assumed to be monoatomic i.e. the adiabaticity index $\gamma = 5/3$). Thus, the term Q appears to proportional to the mass density ρ : $Q = A(t)\rho$, $A = 4\pi z_p^2 e^4 z_a j_0 / m_a m_e v_p^2$. In the following we will also neglect in the energy conservation equation the radiation losses. The energy conservation equation takes, hence, the form

$$\frac{\partial p}{\partial t} + u \frac{\partial p}{\partial x} + \gamma p \frac{\partial u}{\partial x} = (\gamma - 1) A \rho \quad (3)$$

where now x is the coordinate measured perpendicular to the foil from its symmetry plane. Inserting the solution (2) into the equations (1) and (3) we can observe that continuity equations is always satisfied. The Euler equation and the energy conservation equation (3) are satisfied if the condition

$$\frac{d^2 \mu}{dt^2} - \frac{1}{\mu} \left(\frac{d\mu}{dt} \right)^2 = -2 \mu^2 \phi \quad (4)$$

resp. the condition

$$\left(\frac{d\phi}{dt} - \gamma \phi \frac{d \ln \mu}{dt} \right) F(\xi) = (\gamma - 1) A \mu \frac{dF}{d\xi} \quad (5)$$

are fulfilled. The condition (5) shows that for problems with the energy source term proportional to the mass-density a physically reasonable (i.e.

decaying with the distance x) Sedov-type solution (2) exists provided $dF/d\xi = -F$ i.e. for $F \sim e^{-\xi}$. The function ϕ must herewith satisfy the equation

$$\frac{d\phi}{dt} - \gamma\phi \frac{d\ln\mu}{dt} = -(\gamma-1) A \mu. \quad (6)$$

Summing up, one can conclude that for the isothermal plasmas described by an ideal gas EOS the self-similar Sedov-type solution for the problems with an energy-source term $Q \sim \rho$

$$\rho(x,t) = \frac{M\mu(t)}{\sqrt{\pi}} e^{-\mu^2 x^2}, \quad p(x,t) = \frac{M\phi(t)}{\sqrt{\pi}} e^{-\mu^2 x^2}, \quad u = -\frac{d\ln\mu}{dt} x \quad (7)$$

(M is mass of the foil per cm^2 of its surface) exists if and only if the density profile has the gaussian form, $\rho \sim \frac{M\mu}{\sqrt{\pi}} e^{-\mu^2 x^2}$. The formula (7) represents a rigorous solution of the problem in case initial density profile $\rho \sim e^{-x^2/d^2}$ of the plane target for $t = 0$ has the gaussian form as well. The quantity $x_0(t) = 1/\mu$ having the meaning of the half-width of the target must, hence, satisfy the initial condition $x_0 = d$, (d is the half-width of the foil for $t = 0$). Assuming also that the foil was initially at rest, one can formulate second initial condition as $(d\mu/dt) = 0$ for $t = 0$. Assuming $j_0 = \text{const}$ and introducing appropriate dimensionless variables $\xi = x_0/d = 1/\mu d$, $\theta = t/\tau$, $\tau = (d^2/2A)^{1/3}$ we can reduce (4), (6) to the equation

$$3\xi \frac{d^2\xi}{d\theta^2} + \left(\frac{d\xi}{d\theta}\right)^2 = \theta \quad (8)$$

with initial conditions $\xi = 1$, $\frac{d\xi}{d\theta} = 0$ for $\theta = 0$ which is identical with that found earlier in [4] by the method based on replacement of the system of hydrodynamical equations by a set of ordinary time-dependent equations obtained by a space averaging. The equation (8) defines an universal function $\xi = \xi(\theta)$ found by numerical integration in [5] which can be used for interpretation of different particular cases studied in experiments. For $\theta \rightarrow \infty$ the equation (8) allows a solution

$$\xi = \sqrt{\frac{2\theta^3}{9}} = \sqrt{\frac{4W}{9Md^2} t^{3/2}}. \quad (9)$$

(Note that between the constant A defined above and the energy deposition W per a cm^2 of the foil surface an evident relation $A = W/M$ exists). The formula (9) is identical with that found in [4] by the method of space-averaging. As follows from (6) and (9) corresponding asymptotical expression for the function ϕ is $\phi = (W/4Mt)^{1/2}$.

The regularities described above are valid for any plasma compositions. However, to find the temperature of the plasma we need EOS $p = \rho(1+z)T/m_a$ where ρ is the density of the plasma ions and $z = n_e/n_0$ is their effective charge defined by the Saha formulas. Using the solution (7) one can express T through the functions ϕ, μ defined above: $T = m_a \phi / (1+z)\mu$. For $t \rightarrow \infty$, $z=1$, we have, according to (9), $T = WM_a t / 6M$. We must finally remark that for $\frac{t}{\tau} = \theta \gg 1$ the solutions obtained here do not depend on the initial width $2d$ of the target. It allows to formulate a conjecture that in this asymptotical case the solutions (7) are valid for any initial form of the boundary of a plane target, i.e. for a metal foil ($\rho=\rho_0=\text{const}$, $|x|<d$, $t=0$). Similar situation is known to exist for other hydrodynamical problems, e.g. the expansion of a spherical gas cloud ($\rho=\rho_0=\text{const}$, $r < R$, $t=0$) into vacuum is known to tend quickly to the self-similar solution not dependent on the initial radius of the cloud R [6]. However, only numerical calculations can substantiate this conjecture for our case.

References

- [1] L.I. Sedov, Soviet Physics-Doklady (in Russian) XC, (1953), 735
- [2] L.I. Sedov, Similarity and Dimensional Methods in Mechanics, Cleaver-Hume Press, London, (1959), Chap IV, §10.
- [3] S.I. Braginskii, in Rev. Plasma Physics (ed. M.I. Leontovich), v.1, (1965), p. 275
- [4] Yu.S. Sayasov, Helv. phys. Acta, 57, (1984), 280
- [5] K.A. Long, Yu.S. Sayasov, N.A. Tahir, in Proc. of the int. Conf. on Atomic Physics for ion beam Fusion, Rutherford Lab. (1984), to be published.
- [6] P. Molmud, Phys. Fluids 3, (1960), 362

LICHTSTREUUNG AN DICHTEFLUKTUATIONEN MIT STATIONAEREM CO₂-LASER
UND OPTISCHEM UEBERLAGERUNGSEMPFANG *

R. Philipona, Physikinstitut, Universität Freiburg, CH-1700 Freiburg/Schweiz

Abstract: Kollektiv-Oszillationen, wie Wellen im Plasma oder Dichtefluktuationen, können durch kohärente Thomsonstreuung diagnostiziert werden. Ein Experiment mit einem stationär arbeitenden 50W CO₂-Laser und optischem Überlagerungsempfang auf einem photoleitenden HgCdTe-Detektor ist zu diesem Zweck im Aufbau. Als Dummyexperimente werden optischer Überlagerungsempfang eines beugenden Drahtes, der zur Justierung der Optik dient, sowie Rayleighstreuung an Ultraschallwellen aufgezeigt.

1. Einleitung

Viele interessante Fluktuation-Phänomene können durch Laserstreuexperimente untersucht werden [1]. Die Wechselwirkung des Laserstrahles mit dem System ist nur sehr schwach, wodurch das zu untersuchende Medium selbst nicht beeinflusst wird. Heute werden leistungsstarke CO₂-Laser eingesetzt um Dichteschwankungen in Plasmen zu untersuchen. Die Frequenz des CO₂-Lasers liegt weit über den natürlichen Frequenzen der meisten Laborplasmen und wird daher weder absorbiert noch wesentlich gebrochen. Die hohe Ausgangsleistung ermöglicht das sehr schwache Streusignal, welches zudem durch homodynem Überlagerungsempfang auf gekühlten IR-Detektoren verstärkt wird, zu erfassen.

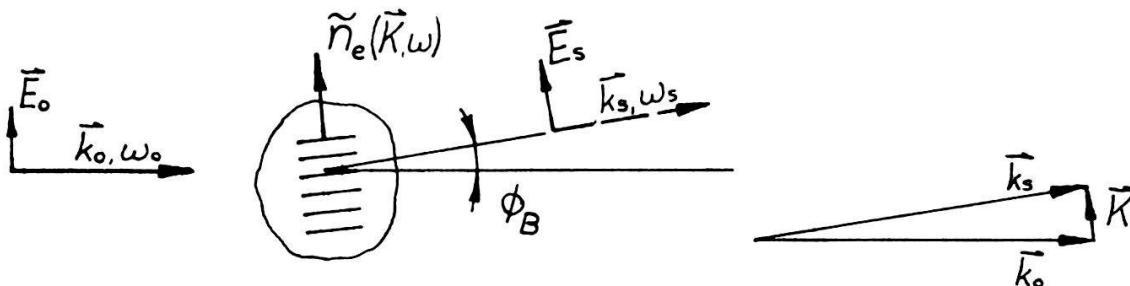
2. Kollektiv-Kleinwinkelstreuung

Wir interessieren uns für das Kollektivverhalten der Elektronen, im Gegensatz zur Betrachtung des Einzelelektrons in einer Dichtefluktuation und wählen daher eine Laserwellenlänge λ_0 die uns erlaubt die Wellenlänge Λ der Kollektiv-Oszillationen zu messen. Die Elektronen-Debyeabschirmung λ_{De} ist ein Mass für das Kollektivverhalten der Elektronen und da die Streuung, aufgrund der reziproken quadratischen Abhängigkeit der Teilchenmasse, vorwiegend an den Elektronen erfolgt, bestimmt λ_{De} den Grad mit welchem das Kollektivverhalten des Plasmas durch Lichtstreuung bestimmt werden kann. Dieser Zusammenhang wird durch den Streuparameter α wie folgt definiert:

*Diese Arbeit wurde durch die Unterstützung des Schweiz. Nationalfonds ermöglicht.

$$\alpha = \frac{\Lambda}{2\pi \lambda_{De}}$$

Von einem Kollektivverhalten der Elektronen sprechen wir dann, wenn $\Lambda > \lambda_{De}$ d.h. der Streuparameter wird für Kollektiv-Thomsonstreuung $\alpha > 1$. Plasmawellen mit kleineren Wellenlängen als λ_{De} unterliegen der Landaudämpfung. Die untere Grenze der zu untersuchenden Wellen wird damit durch die Beziehung $\Lambda \gtrsim 2\pi \lambda_{De}$ festgelegt. Die obere Grenze ist weniger genau bekannt. Transversal zum Magnetfeld ergeben verschiedene Modelle sowie bisher gemachte Experimente einen noch möglichen unstabilen Mode bei einer Wellenlänge von $\Lambda_1 \approx 2\pi \rho_i$, wo ρ_i der Ionen-Larmorradius ist. Mit der zusätzlichen Annahme eines Faktors 3 würden die auftretenden Fluktuationen im Wellenlängenbereich von $2\pi \lambda_{De} \leq \Lambda \leq 3(2\pi \rho_i)$ liegen [2]. Für unsere Plasmaparameter bedeutet dies Wellenlängen von $1/10 \leq \Lambda \leq 18 \text{ mm}$. Der ins Plasma einfallende Laserstrahl mit Frequenz ω_0 und Wellenzahl \vec{k}_0 wird durch die Elektronen-Dichtefluktuation $\tilde{n}_e(\vec{K}, \omega)$ bei einem Winkel ϕ_B gestreut.



Die aufgrund des Dopplereffektes erfolgte Frequenzverschiebung des gestreuten Signales kann als sehr klein betrachtet werden, wodurch das Vektordiagramm der Impulserhaltung wie folgt umschrieben werden kann

$$|\vec{K}| \approx 2 |\vec{k}_0| \sin \frac{\phi_B}{2}$$

Hier ist K die Wellenzahl der streuenden Dichtefluktuation. Die Berechnung des Streuwinkels ϕ_B führt zur Braggbeziehung

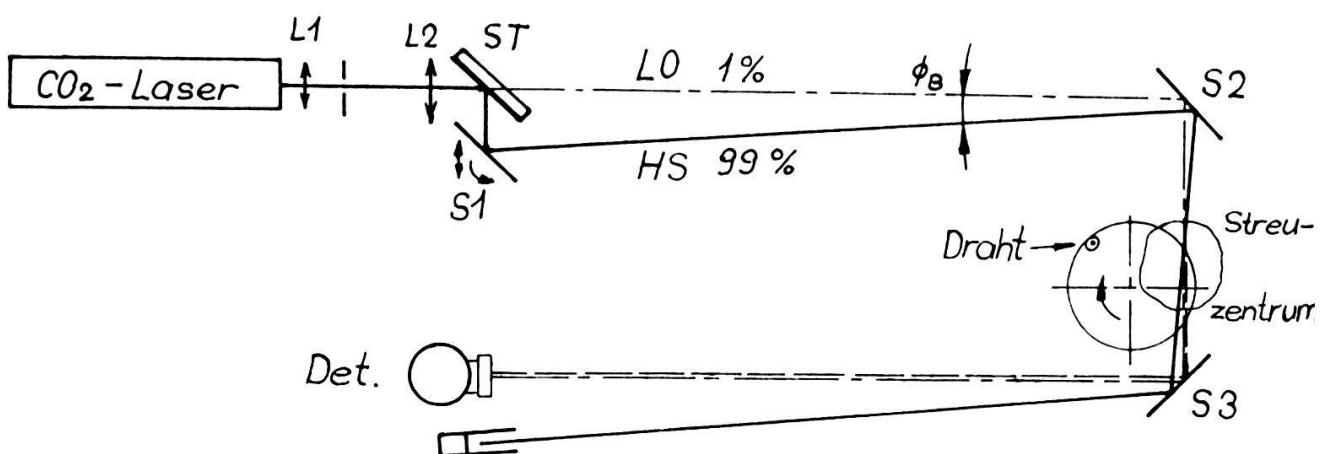
$$\phi_B = 2 \sin^{-1} \left(\frac{\lambda_0}{2\Lambda} \right)$$

Die Wellenlänge λ_0 muss also kleiner sein als 2λ , um eine Winkelauflösung der Streuung zu erreichen. Die kurze Laserwellenlänge $\lambda_0 = 10.6 \mu$ führt zu sehr kleinen Streuwinkeln $\phi_B \sim 1^\circ$.

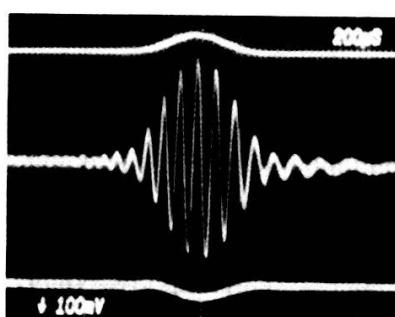
Die zu erwartende Leistung der Streusignale liegt in der Größenordnung von $P_s / P_0 \sim 10^{-13}$. Dieses schwache Signal wird durch homodyne Überlagerung mit einem Lokaloszillatator verstärkt. Die Analyse des Leistungsspektrum gibt Aufschluss über die Frequenz, Wellenzahl und Amplitude der Plasmawelle.

3. Beugung am Draht zur Justierung der Optik

Zur Erfassung des sehr schwachen Streusignales der Kleinwinkelstreuung wird das optische Überlagerungsprinzip angewendet. Dabei wird ein vor der Streuung vom Laserstrahl abgetrennter Lokaloszillator auf dem Detektor mit dem Streusignal überlagert. Die Parallelität der auf dem Detektor vereinten Signale ist für eine optimale Mischung sehr wichtig. Dies verlangt einen optischen Strahlengang der genau ausgerichtet werden kann.



Der zum Hauptstrahl HS schwache Lokaloszillator LO, wird fest auf den Detektor eingestellt. Mit dem beweglichen Spiegel S1 kann der HS so geführt werden, dass der Streuwinkel ϕ_B vorgegeben wird. Damit sich das vom HS gestreute Signal mit dem LO überlagert, müssen sich die beiden Strahlen im Streuzentrum treffen. Zur Kontrolle dieses Zusammentreffens von HS und LO wird ein in eine Drehscheibe senkrecht zur Streuebene gespannter dünner Draht durch die beiden Strahlen bewegt. Das vom Draht durch Beugung abgelenkte Signal des HS-Strahles überlagert sich mit dem LO-Strahl auf dem Detektor. Durch Abdecken von HS oder LO können die Signale einzeln auf dem KO verfolgt und zeitlich überlagert werden. Die Überlagerung beider Signale zeigt eine Schwebung der durch Dopplereffekt leicht verschobenen Frequenzen.



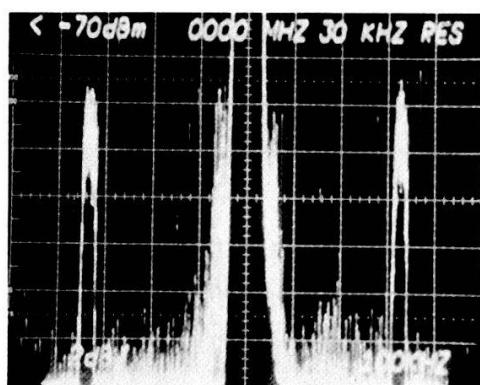
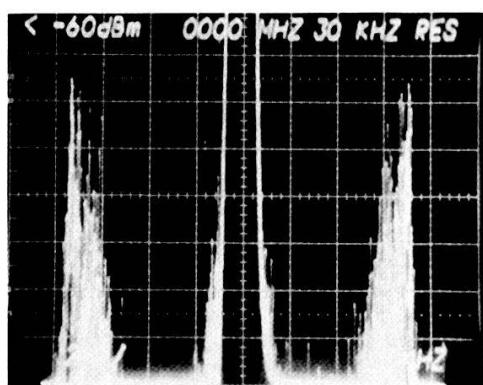
Beugungsimpuls von HS ohne LO

Beugungsimpuls von HS überlagert mit LO

Durch Draht modulierter LO ohne HS

4. Rayleighstreuung an Ultraschallwellen

Die Kleinwinkelstreuung wie sie hier aufgezeigt wird, verwendet einen recht komplizierten Strahlengang, welcher im Labor an einer Plasmamaschine vielen störenden Elementen ausgesetzt ist. Eine einfache Methode den Aufbau zu testen und eine Kalibrierung vorzunehmen besteht darin, Streuung an Ultraschallwellen zu erzeugen [3]. Ein im Streuzentrum angebrachter Piezokristall wird zu diesem Zeck bei einer Ultraschallfrequenz angeregt, deren entsprechende Wellenlänge λ_s gleich der zu untersuchenden Plasmawellenlänge λ ist. Da die Streuung an Schallwellen ebenfalls der Braggbeziehung folgt, kann die Wellenzahl, sowie deren spektrale Auflösung experimentell bestimmt werden. Ueber die Eigenschaften des Piezokristalles kann auf die Amplitude der Dichteschwankung geschlossen werden und daraus auf die zu erwartende gestreute Leistung. Eine Kalibrierung der Messanordnung ist also möglich, d.h. experimentell kann ein Koeffizient zwischen der gemessenen Leistung und der Amplitude der Fluktuation bestimmt werden.



Die beiden Aufnahmen zeigen Streuung an Ultraschallwellen, wobei der Streuwinkel auf eine Fluktuationswellenlänge von $\lambda = 1 \text{ mm}$ eingestellt ist. Die linke Aufnahme zeigt die Streuung am breiten Ultraschallspektrum einer Druckluftdüse. die rechte Aufnahme zeigt die Streuung an Schallwellen die von einem Piezokristall stammen, der bei einer Frequenz von 335 kHz angeregt ist.

Der Autor dankt allen Mitarbeitern der Forschungsgruppe für interessante Diskussionen im Zusammenhang mit dieser Arbeit. Ein besonderer Dank für wertvolle Anregungen sei an die Mitarbeiter der Lasergruppe des CRPP der EPFL in Lausanne gerichtet.

Referenzen: [1] R.E. Slusher and C.M. Surko, Phys. Fluids 23, 472 (1981)

[2] A. Truc et al., EUR-CEA-FC-1135, Report (1981)

[3] J.F. Valley and R.E. Slusher, Rev. Sci. Inst. 54, 1157 (1983)

Dichte- und Magnetfeldfluktuationen in einem zylindrischen
Mikrowellen-Plasma

E. Egger, B.G. Vaucher, Yu.S. Sayasov und H. Schneider
Physikinstitut der Universität, CH-1700 Freiburg/Schweiz

In einem schwach ionisierten Helium Plasma wurden kohärente Dichtefluktuationen mit Hilfe der digitalen Spektralanalyse untersucht und als dissipative Driftwellen identifiziert. Es wurden auch kohärente Magnetfeldfluktuationen beobachtet, die dieselbe Frequenz aufweisen, wie die dominierende Driftwelle. Zwischen Dichte- und Magnetfeldfluktuationen konnte eine feste Phasenbeziehung nachgewiesen werden. Wir zeigen quantitativ, dass diese Magnetfeldfluktuationen mit den Strömen zusammenhängen, die wegen der Driftwellenbewegung in zylindrischen Plasmen entstehen.

ANDO XI : Schwerpunktthema: Datenaufnahme und Datenverarbeitung

Artificial Intelligence: Impact on pure and applied science

B.Humpert

HASLER A.G., Research Laboratories, CH-3000 Bern and
Institute of Nuclear Physics, University of Lausanne.

Research in artificial intelligence has in recent years lead to significant progress. The "Theorem Provers" are able to find the proof of conjectured mathematical theorems, and the "Expert Systems" allow for the 'intelligent' intercorrelation of a given data-set according to chosen criteria. We explain the basic tools and reasoning, and we give examples of their successful application.

Augmentation des taux d'acquisition et sélection des données à l'aide d'un processeur rapide en tampon

C. Bizeau, F. Bourgeois, J.-P. Dufey, A. Vascotto
Division DD, CERN, 1211 GENEVE 23

En physique des hautes énergies, l'utilisation d'un processeur répondant rapidement aux interruptions et groupant les données de plusieurs événements avant leur transfert à l'ordinateur principal a permis une augmentation substantielle du taux d'acquisition. De plus, un algorithme de sélection plus élaboré que celui de l'électronique de décision peut être exécuté en parallèle par le processeur; sa programmation et son développement sont effectués sur l'ordinateur hôte dans un langage courant (FORTRAN).

Data Acquisition and Analysis in Tokamak Experiments.

J.B. Lister

Centre de Recherches en Physique des Plasmas, Association Euratom - Confédération Suisse, EPFL - 1007 Lausanne / Switzerland

The present generation of Tokamak experiments in the field of Nuclear Fusion research relies extremely heavily on automated systems both for the control of the experiment and for the acquisition, storage and subsequent analysis of the experimental data. The nature of the problem will be outlined, and the solution used on TCA, the research Tokamak in Lausanne, as well as JET (EC) and TFTR (USA) will be described.

Decentralized data acquisition systems using standard interfacingA. Kulik, G. Gremaud

Institut de Génie Atomique, EPFL, PHB-Ecublens, 1015 Lausanne

Studies of the elastic and anelastic properties of solids need precise measurements of internal friction or ultrasonic attenuation as a function of the temperature stress amplitude and frequency. Choice of the computer, programming language, interface standard (IEEE 488) and electronics, has a large impact on the development time, performance and prices. Our experience, acquired with five different installations working in a wide frequency range (10^{-4} Hz - 30 MHz) has shown advantages of decentralized systems. Conclusions can be useful in other fields of physics where slow and medium speed data acquisition systems are needed.

Mesures continues du taux de renouvellement d'air dans plusieurs locaux habitésD. Quévit, J.-L. Scartezzini, C. Roecker
GRES-EPFL, Bâtiment LESO, 1015 LAUSANNE

La mesure du taux de renouvellement d'air est effectuée simultanément au LESO sur 10 locaux, au moyen d'un gaz traceur. Deux méthodes sont principalement utilisées : celle du "décrément logarithmique" et celle de la "concentration constante". Cette dernière, utilisable en présence d'occupants, a nécessité le développement d'un programme de régulation adéquat. Un programme d'acquisition, implémenté sur mini-ordinateur, permet le suivi de l'expérience selon l'une ou l'autre des méthodes mentionnées. A la fin de celle-ci, un programme de dépouillement effectue automatiquement l'interprétation des résultats.

Ein Laser-Scanning-Experiment zur ortsaufgelösten Bestimmung von Ladungsträgerlebensdauer und spezifischem Widerstand in SiliziumJ. Waldmeyer
Brown Boveri Forschungszentrum, 5405 Baden

Für die Konzeption und die praktische Realisierung von Halbleiter-Leistungsbauelementen ist es wichtig, den spezifischen Widerstand und die Trägerlebensdauer und insbesondere deren örtliche Abhängigkeit in einem Wafer vor und während den Prozessen zu kennen. Es wird ein vollautomatisches und dennoch flexibles Experiment beschrieben, bei dem mit Hilfe eines HeNe-Lasers Träger generiert werden und der an einem sperrfähigen Übergang gesammelte Strom detektiert und auf verschiedene Weise visualisiert werden kann. Zwei Beispiele belegen die Einflüsse von spezifischem Widerstand und Lebensdauer.

Multiprocessor Systems in Large High Energy Physics ExperimentsW.J.Haynes, UA1 Collaboration, CERN

Large high energy physics experiments require multiprocessor capabilities to perform their data acquisition and online readout control. The UA1 experiment is a large multi-purpose particle physics detector which has been working, successfully, for several years at the CERN proton-antiproton collider. For each event the front end electronics generates 1.6 Mbytes of data information which is reduced to 100 kbytes in less than 30 msec. Data can be accessed by a number of 16 and 32-bit computers which perform the processing and monitoring of the whole system or various subsystems. From an initial collision rate of several kHz various triggering devices are used, including analysis based refinements by 168/E processors, to reduce the event rate to acceptable tape writing speeds (about 4-5 Hz). In addition a variety of microprocessor based computers control and monitor the experimental apparatus. To provide greater flexibility and more distributed intelligence, for a continually upgrading detector, the system is currently being improved by means of a multirate/multi-processor system based on VME/VMXbus and the M68000 microprocessor family, and the incorporation of 3081/E emulators.

KERN- und TEILCHENPHYSIK

Calculation of electrical fields and potentials
in multigap wire proportional chambers with wire cathode planes

J.-F. Loude

Institut de Physique nucléaire de l'Université, BSP, CH-1015 Lausanne

1. MWPC equivalent outer radius

Starting from the well known formula [1,2] giving the y-direction electrical field in a cathode foil MWPC such as shown in figure 1a:

$$E_a(y) = [Q_{wa}/(2\epsilon_0 s_a)] \cdot \coth(\pi y/s_a) \quad (1)$$

or from the equivalent formula

$$E_a(y) = (\pi r_a E_{ao}/s_a) \cdot \coth(\pi y/s_a) \quad (2)$$

where $E_{ao} = Q_{wa}/(2\pi\epsilon_0 r_a)$ is the field at the surface of the anode wire and Q_{wa} its charge per unit length (in SI units), let us calculate the chamber voltage V_o by integrating $E_a(y)$ from $y = r_a$ to $y = L_{ac}$:

$$V_o = (\pi r_a E_{ao}/s_a) \cdot \int \coth(\pi y/s_a) dy = E_{ao} r_a \cdot \ln \sinh(\pi y/s_a) \Big|_{r_a}^{L_{ac}} \quad (3)$$

As long as $r_a/s_a \ll 1$ and $L_{ac}/s_a > 1$, the applied voltage and the fields are given by formulae involving $\ln K_{ac}$, the definition of which is given below:

$$\ln K_{ac} = (\pi L_{ac}/s_a) + \ln(s_a/2\pi r_a) \quad (4)$$

$$V_o = E_{ao} r_a \ln K_{ac} = (Q_{wa} \ln K_{ac})/(2\pi\epsilon_0) \quad (5)$$

$$E(r) = V_o / (r \cdot \ln K_{ac}) = E_{ao} r_a / r = Q_{wa} / (2\pi\epsilon_0 r) ; (r \ll s_a) \quad (6)$$

$$E(r) = E_\infty = \pi V_o / (s_a \ln K_{ac}) = \pi E_{ao} r_a / s_a = Q_{wa} / (2\epsilon_0 s_a) ; (s_a < r \leq L_{ac}) \quad (7)$$

Introducing now an equivalent radius R_{eq} defined by

$$R_{eq} = (s_a/2\pi) \cdot \exp(\pi L_{ac}/s_a) \quad (8)$$

one can write the dimensionless $\ln K_{ac}$ as

$$\ln K_{ac} = \ln(R_{eq}/r_a) \quad (9)$$

The formula (6) for the field in the vicinity of the anode wire can be written

$$E(r \ll s_a) = V_o / [r \cdot \ln(R_{eq}/r_a)] \quad (10)$$

and compared to the similar expression for a cylindrical proportional counter (PC): the outer radius has been simply replaced by R_{eq} , the equivalent outer radius of the MWPC.

As a consequence, calculations of the gas multiplication factor M in PCs also apply to MWPCs as long as the starting radius of the avalanches remains much smaller than the anode wire spacing s_a . The gain formula of Diethorn [3]

$$\ln M = (E_{ao} r_a \cdot \ln 2 / \Delta V) \cdot \ln [E_{ao} / (p E_c)] \quad (11)$$

(where ΔV and E_c are gas parameters and p its pressure) shows that

- there is no gas multiplication around positively biased wires if $E_{ao} < p E_c$; a safe limit seems to be about $4MV/m$ in chambers filled with the "magic" mixture;
 - in chambers of various geometries but using the same gas mixture and anode wires of a standard diameter (typically $20\mu m$), M is entirely determined by E_{ao} .
- Predictions and comparisons of working voltages are thus possible.

Concerning the far field E_∞ , formula (7) shows that any array of parallel wires carrying the same charge $Q = Q_w / s$ (per surface unit) produces the same field.

2. MWPC with wire cathode planes

Replacing the foil cathodes by wire planes (fig. 1b and 1c), a voltage increase $v_b - v_o$ is necessary to keep E_{ao} constant while producing the field around the cathode wires. First consider (fig. 1c) the case when this field is symmetrical. As the total charge must be balanced, anode and cathode arrays carry the same charge $|Q|$ and produce then the same far field E_∞ .

Let us divide L_{ac} into two partial intervals and write the corresponding $\ln K$:

$$L_a = L_{ac} s_a / (s_a + s_c) \quad L_c = L_{ac} s_c / (s_a + s_c) \quad (12)$$

$$\ln K_a = (\pi L_a / s_a) + \ln (s_a / 2\pi r_a) \quad \ln K_c = (\pi L_c / s_c) + \ln (s_c / 2\pi r_c) \quad (13)$$

The total voltage is the sum of v_a on L_a and v_c on L_c

$$v_b = E_{ao} r_a \cdot \ln K_a + E_{co} r_c \cdot \ln K_c \quad (14)$$

Taking into account the charge balance $|Q_a| = |Q_c|$, it is easy to show that

$$E_{co} = E_{ao} (r_a s_c) / (r_c s_a) \quad (15)$$

Writing finally $v_b = (1+v)v_o$, the relative voltage increase v is

$$v = [\ln K_a + (s_c / s_a) \ln K_c] / \ln K_{ac} \quad (16)$$

The numerical calculations performed by Beingessner and Bird [4] apply to a single gap MWPC as shown in figure 1b and gives a result v^* smaller than ours by a factor of about 2 (at least for typical chamber geometries) :

$$v^* \approx v/2 \quad (17)$$

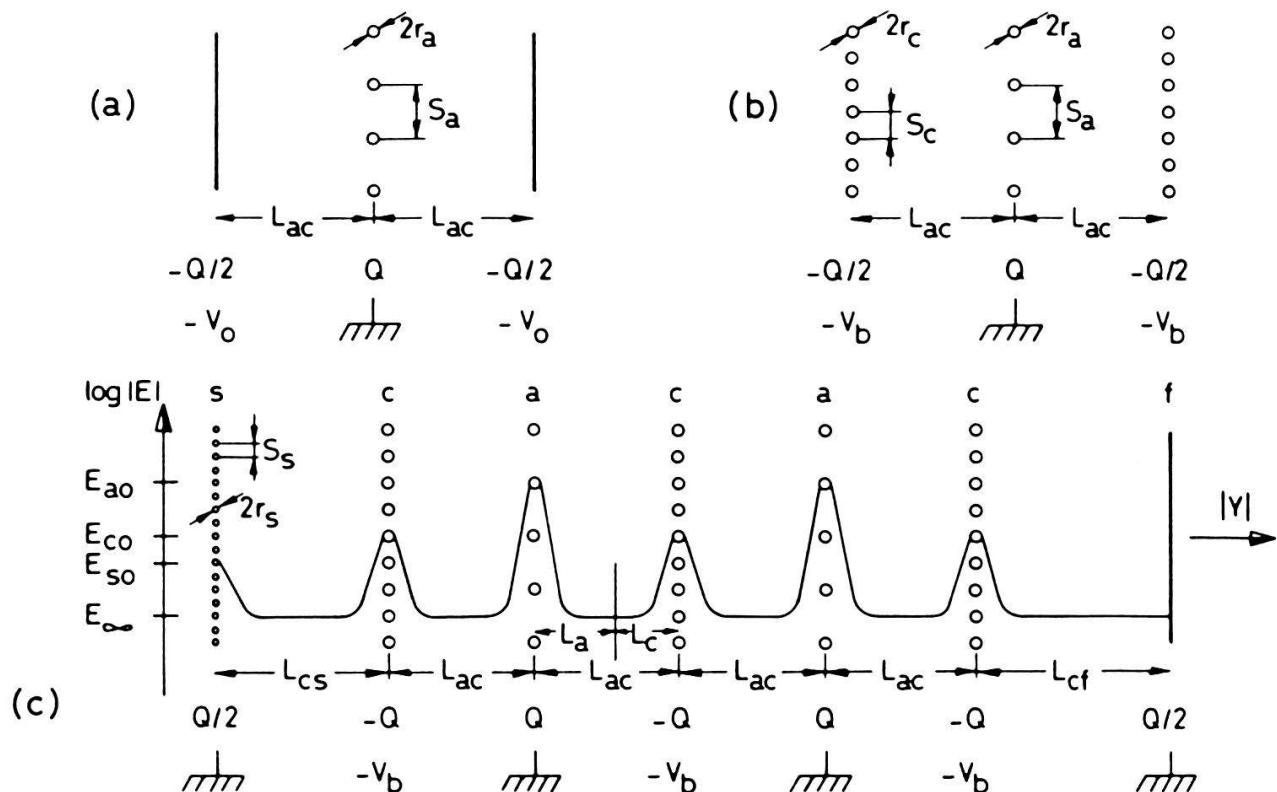


Figure 1
MWPC geometry. (a):single gap chamber, foil cathodes. (b):single gap chamber, wire cathodes. (c):multigap chamber between grounded screen planes; a sketch of the field is superimposed

The foil screen to cathode distance L_{cf} is directly calculated from the known value of E_{co} , applying formulae (5) and (4) to this gap

$$\ln K_{cf} = v_b / (E_{co} r_c) \quad (18)$$

$$L_{cf} = (s_c/\pi) \{ [v_b/(E_{co} r_c)] - \ln [s_c/(2\pi r_c)] \} \quad (19)$$

The wire screen to cathode distance L_{cs} is obtained by a straightforward calculation, dividing again this gap into two partial gaps. A voltage increase v_s^* ($\approx v_s/2$) should actually be used for the wire screen. The correct value L_{cs}^* of the gap will be thus approximately the mean between the values of L_{cf} and L_{cs} that appear in table I.

3. Experimental data and conclusions

The main geometric and electrical parameters of some chambers are compared in table I. SIN and UA-6 chambers are multigap MWPCs (3 anode planes sandwiched between 4 wire cathode planes) carefully built to avoid an excessive value of E_{co} . The SIN chambers have no screen plane; the difference between v

(internal cathode planes) and v^* (external ones) is high enough to explain why the measured plateaus of both external signal planes begin at a voltage lower by about 100 V than the plateau of the central one. The UA-6 chambers are similarly built, but screen planes have been added; gas multiplication around the screen wires is not allowed by the low value of E_{so} . Exact calculations of v^* and v are available for BB1 and BB2; the short observed plateau of BB1 (which had to be converted into BB2 by removing every second anode wire) was in all likelihood due to the high value of E_{co} .

Table I

Comparison of MWPC geometries, fields and potentials

MWPC Ref.	SIN/PS [5,6]	UA-6/PC5 [7]	UA-6/PC2 [unpublished]	BB1 [4]	BB2 [4]
$s_a; r_a$ mm	$2; 1.0 \cdot 10^{-2}$	$3; 1.0 \cdot 10^{-2}$	$2; 1.0 \cdot 10^{-2}$	$2; 1.0 \cdot 10^{-2}$	$4; 1.0 \cdot 10^{-2}$
$s_c; r_c$ mm	$1; 2.5 \cdot 10^{-2}$	$1; 2.5 \cdot 10^{-2}$	$1; 2.5 \cdot 10^{-2}$	$2; 2.5 \cdot 10^{-2}$	$2; 2.5 \cdot 10^{-2}$
L_{ac} mm	8.00	6.00	5.00	6.35	6.35
$s_s; r_s$ mm	unscreened	$1; 2.5 \cdot 10^{-2}$	$1; 3.75 \cdot 10^{-2}$	unscreened	unscreened
L_{cs} mm		9.1 ¹⁾	6.7 ¹⁾		
L_{cf} mm		9.7 ¹⁾ ; 14.0 ²⁾	7.2 ¹⁾ ; 13.0 ²⁾		
E_{ao} MV/m	29.00	29.00	29.00	24.00	24.00
V_{ao} V	4648	2943	3281	3224	2194
E_∞ MV/m	0.456	0.3037	0.456	0.377 ³⁾	0.188 ³⁾
E_{co} MV/m	5.800 ³⁾	3.867 ³⁾	5.800 ³⁾	9.600 ³⁾	4.800 ³⁾
E_{so} MV/m		3.867 ³⁾	3.867 ³⁾		
v %	5.78	6.08	8.18	18.9 ⁴⁾	13.9 ⁴⁾
v^* %	2.9			8.8	5.9

¹⁾ calculated values; ²⁾ actual values; ³⁾ for undistorted field around the wires; ⁴⁾ calculated as for screened chamber.

Using very simple mathematical formulae, we are therefore able to calculate the geometries, fields and operating voltages of multigap MWPCs with a precision adequate for engineering purposes.

References

- [1] G. Charpack, Ann. Rev. Nucl. Sci. 20(1970)195
- [2] G.A. Erskine, Nucl. Instr. and Meth. 105(1972)565
- [3] G.F. Knoll, Radiation detection and measurement (John Wiley & Sons, 1979) p. 193
- [4] S.P. Beingessner and L. Bird, Nucl. Instr. and Meth. 172(1980)613
- [5] E. Winkelmann, Thèse, Université de Lausanne (1978)
- [6] J.C. Alder et al., Nucl. Instr. and Meth. 160(1979)93
- [7] J. Antille et al., Nucl. Instr. and Meth. 217(1983)327

Untersuchungen über die Eigenschaften von BGO-Kristallen

G. Czapek, A. Flückiger, D. Frei, B. Hahn, C. Hug,
 E. Hugentobler, U. Moser, E. Ramseyer, H. Scheidiger,
 P. Schlatter und G. Stucki
 Laboratorium für Hochenergiephysik, Universität Bern,
 Sidlerstrasse 5, 3012 Bern
 R. Abela, D. Renker und E. Steiner, SIN, Villigen

70 hexagonale BGO-Kristalle von 20 cm Länge und 5.4 cm Schlüsselweite wurden auf ihre optischen Eigenschaften sowie mit Quellen und Protonen von 100 MeV getestet. Besondere Aufmerksamkeit wurde der Uniformität der Lichtsammlung über das ganze Kristallvolumen geschenkt. Es wird besprochen, mit welchen Methoden kleine Abweichungen in der Uniformität durch geeignete Reflektoranordnungen korrigiert werden können. Die Lichtsammlung kann auf $\pm 1\%$ ausgeglichen werden.

Suche nach magnetischen Monopolen in der kosmischen Strahlung

G. Czapek, B. Hahn, W. Krebs und P. Michel
 Laboratorium für Hochenergiephysik, Universität Bern,
 Sidlerstrasse 5, 3012 Bern

Mittels eines Detektors aus Szintillationsebenen (2m x 2m) konnte während einer Beobachtungszeit von 200 Tagen eine verbesserte obere Grenze für einen Monopolfluss von

$$j_m < 1 \cdot 10^{-8} \text{ m}^{-2} \text{ sr}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ (90\% CL)}$$

gefunden werden, wobei ein Geschwindigkeitsbereich $1 \cdot 10^{-4} c \leq v \leq 5 \cdot 10^{-2} c$ und ein Bereich der Ionisation von $\frac{dE}{dx} \geq \frac{1}{50} \frac{dE}{dx}|_{\text{min}}$ akzeptiert wurde.

Precision Measurement of the Mass Difference $m_{\pi^-} - m_{\pi^0}$

J.F. Crawford*, M. Daum*, R. Frosch*, B. Jost*, P.-R. Kettle*, R.M. Marshall**,
 R.C. Minehart** and K.O.H. Zicock**

*SIN, Schweizerisches Institut für Nuklearforschung, CH-5234 Villigen

**Physics Department, University of Virginia, Charlottesville, VA 22901, USA

We have started to measure the difference between the masses of the charged and neutral pion. The main motivation for this measurement is to contribute, together with a planned [1] measurement of the rate of pion beta decay ($\pi^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu_e$), to an accurate test of present-day theories of the electro-weak interaction. We stop π^- mesons in liquid hydrogen and measure the velocity of the neutrons from the charge exchange reaction $\pi^- p \rightarrow \pi^0 n$. From a first test we obtain the preliminary estimate $m_{\pi^-} - m_{\pi^0} = (4.594 \pm 0.003) \text{ MeV}/c^2$. For comparison the present world average [2] is $(4.6043 \pm 0.0037) \text{ MeV}/c^2$.

[1] K. Borer et al., SIN Proposal R-82-4 (1982).

[2] Particle Data Group, Rev. Mod. Phys. 56, No.2, Part II (1984).

First results in the measurement of the energy dependence of the tensorpolarization t_{20} and t_{22} in elastic $\pi^{\pm}d$ scattering by a novel method.

W.Grüebler, J.Ulbricht, V.König, P.A.Schmelzbach, K.Elsener, Ch.Forstner, M.Bittcher, D.Singy, B.Vuaridel and W.Z.Zhang (Institut für Mittelenergiephysik, ETH, 8093 Zürich)

A.Chisholm, R.E.White (Physics Department, University of Auckland, Auckland, New Zealand)

I.Slaus (Institute Ruder Boskovic, Zagreb, YU-4100)

F.Sperisen (UCLA, Physics Department, Los Angeles CA 90024, U.S.A.)

We have measured the tensorpolarization components t_{20} and t_{22} in elastic $\pi^{\pm}d$ scattering in the energy region between $T_{\pi}=100$ and 150 MeV with a new type of polarimeter. In agreement with former measurements, we obtain once again a strong energy dependence in t_{20} . The value of t_{22} is small and fairly constant in this energy region. We discuss the new polarimeter and the new measuring method in detail.

Absorption geladener Pionen in ${}^3\text{He}$

P. Weber, G. Backenstoss, M. Izycki, P. Salvisberg, M. Steinacher,

H.J. Weyer; Institut für Physik, Universität Basel

S. Cierjacks, D. Gotta, H. Ullrich

Institut für Kernphysik, KFZ und Universität Karlsruhe

M. Furic, T. Petkovic; Universität Zagreb, Jugoslawien

Verzweigungsverhältnisse des π^-, π^0 Ladungsaustauschs und des Absorptionskanals $\pi^- {}^3\text{He} \rightarrow dn$ für gestoppte Pionen wurden gemessen ebenso wie mittels Röntgenkoinzidenzen die zugehörigen Anteile aus dem $1s$ Niveau. Ausserdem konnte mit derartigen Koinzidenzmessungen die Frage nach einem etwaigen Anteil der p Absorption an der unerwartet hohen Dominanz der Absorption an $T = 0$ Nukleonpaaren geklärt werden.

Die Absorption im Flug $\pi^- {}^3\text{He} \rightarrow pnn$ und $\pi^+ {}^3\text{He} \rightarrow ppp$ bei verschiedenen T_{π} wird diskutiert.

Study of (π^-, p) reactions on nuclei : a search for bound states.

C.S. Mishra, G.S. Adams, G.S. Blanpied, B.M. Freedman, C.S. Whisnant (South Carolina), J.-P. Egger (Neuchâtel), B.H. Wildenthal (Drexel), H. Breuer, D. Benton, N.S. Chant, B.G. Ritchie (Maryland), B. Hoistad (Uppsala), A. Brown (Michigan), S. Gilad and R. Redwine (MIT).

Recent results from Indiana have shown that the (p, π^-) reaction is selective in the excitation of discrete states in the residual nucleus. A feasibility study of the inverse (π^-, p) reaction was carried out using EPICS at LAMPF with the hope of observing a similar selectivity. Results on ${}^{12}\text{C}$, ${}^{24}\text{Mg}$, ${}^{27}\text{Al}$, ${}^{40}\text{Ca}$ and ${}^{58}\text{Ni}$ will be presented and discussed.

Nachweis von W-Bosonen mit dem UA2-Detektor am CERN
pp-Collider

UA2-Kollaboration (Bern, Cern, Copenhagen (NBI), Orsay (LAL),
Pavia, Saclay (CEN))

K. Borer, H. Hänni, B. Hahn, E. Hugentobler, P. Mani,
R. Moning, J. Schacher und F. Stocker
Laboratorium für Hochenergiephysik, Universität Bern,
Sidlerstrasse 5, 3012 Bern

Es werden die neuesten Resultate über den Nachweis von
ca. 100 W-Bosonen präsentiert und mit den Vorhersagen des
Standardmodells der elektroschwachen Wechselwirkung ver-
glichen.

Beobachtung von Elektronenpaaren mit invariante Masse
 $\geq 12 \text{ GeV/c}^2$ im UA2-Experiment am CERN pp-Collider

UA2-Kollaboration (Bern, CERN, Copenhagen (NBI), Orsay (LAL),
Pavia, Saclay (CEN))

K. Borer, H. Hänni, B. Hahn, P. Mani, R. Moning, J. Schacher
und F. Stocker
Laboratorium für Hochenergiephysik, Universität Bern

Der 1983 in den Experimenten UA1 und UA2 erfolgte Nachweis von
Leptonenpaaren als Zerfallsprodukte des neutralen intermediä-
ren Bosons Z^0 der schwachen Wechselwirkung hat sich 1984 in
eindrücklicher Weise bestätigt. Daneben konnten im UA2 Experi-
ment Elektronenpaare beobachtet werden, deren invariante Masse
ausserhalb der Z^0 -Resonanz liegen.

Transfert de muons de l'hydrogène sur l'argon et l'hélium

F. BIENZ, P. BERGEM, M. BOSCHUNG, R. JACOT-GUILLARMOD,
G. PILLER, L.A. SCHALLER, L. SCHELLENBERG, H. SCHNEUWLY
(Inst. Phys. Uni Fribourg / CH), G. TORELLI (Ist. Fisica Uni
and INFN Pisa / I), W. REICHARD (Uni Zürich / CH)

Les calculs théoriques du taux de transfert de muons à partir
de l'état ls du système μp sur l'hélium donnent des valeurs de:
 $<10^6$ à $44 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$. Nous avons mesuré le taux de transfert de
muons du système μp sur l'argon, en détectant les rayons X pro-
venant de la cascade de μAr . En ajoutant au mélange $H_2 + Ar$ de
l'hélium, il apparaît un nouveau canal de désintégration du
système μp . En mesurant la différence des deux taux de transfert
sur l'argon, on détermine le taux de transfert sur l'hélium.
La méthode de mesure et les premiers résultats seront présentés.

Etude des rayons-X muoniques et pioniques du ^{237}Np

J.F.M. d'Achard van Enschut, P. David, W. Duinker, C. Gugler, J. Hartfiel, H. Janszen, J. Konijn, T. Krogulski, C.T.A.M. de Laat, T. Mayer-Kuckuk, R. von Mutius, C. Petitjean, S.M. Polikarnov, H.W. Reist, L.A. Schaller, L. Schellenberg, A. Taal
(Amsterdam - Bonn - Darmstadt - Delft - Fribourg - SIN - Warsaw)

Les spectres des rayons-X muoniques et pioniques du ^{237}Np ont été mesurés au SIN. Les muons et les pions ont été stoppés dans une cible de NpO_2 . L'analyse préliminaire des structures des transitions muoniques et pioniques 5g-4f nous a fourni le moment quadrupolaire spectroscopique du noyau: $Q = 3.63 \pm 0.02 \text{ b}$. Les transitions inférieures accusent un mélange des niveaux nucléaires et muoniques. Les paramètres de l'interaction forte pour le niveau pionique 4f ont été déterminés.

A new determination of the π^-H and π^-D 2P-1S strong interaction shifts using crystal diffraction.

E. Bovet, L. Antonuk, J.-P. Egger, G. Fiorucci (University of Neuchâtel), K. Gabathuler (SIN) and J. Gimlett (Caltech).

The 2P-1S X-ray transition energy in pionic hydrogen (π^-H) and pionic deuterium (π^-D) has been measured at SIN. The experimental setup includes a cooled pressurized gas target, a curvedgraphite crystal and a position-sensitive gas proportional counter (PSPC) surrounded on top, back and bottom by five anticoincidence PSPC. Experimental details will be given on background reduction, calibration etc. The results obtained will be presented. The deduced strong interaction shifts and S-wave scattering lengths will be discussed : $a_{\pi-p}$ will be compared with πN phase-shift extrapolations and $a_{\pi-d}$ with recent three body calculations.

 π^0 AND η SPECTROSCOPY AT LEAR

G. Backenstoss, Ch. Findeisen, J. Kuzminsky, J. Repond, L. Tauscher and C. Williams

Basle-Stockholm-Thessaloniki Collaboration at CERN,
1211 Geneva 23, Switzerland

The aim of the experiment is to search for narrow states produced in $p\bar{p}$ annihilations at rest in LH_2 . In the region of a π^0 momentum of 200 MeV/c, which is relevant for baryonium, fluctuations of 2σ significance are observed. The sensitivity for narrow lines in this region is 10^{-3} for a 3σ effect. Thus the sensitivity of this experiment is on the level of that reached in earlier inclusive gamma spectra, where narrow peaks of $1-3 \times 10^{-3}$ yield were seen at $2-3\sigma$.

Annihilations into mesonic channels such as $\pi^0\varrho$, $\pi^0\omega$, π^0A_2 , and π^0E are observed as peaks in the spectra. Through constraint fits, triple coincidences allow the branching ratios for $\pi^0\gamma$ and $\pi^0\pi^0$ to be deduced. For the first time, η 's from annihilations were observed over a large momentum range.

Evaluation de la dimension du coeur de quarks du nucléon à l'aide d'un modèle d'interaction NN

X. Bagnoud

Institut de physique théorique, Pérolles, 1700 Fribourg

Le modèle d'interaction NN utilisé comprend un échange π mésonique et tient compte du premier état excité $\Delta(1236)$ du nucléon. On corrige le facteur de forme du nucléon (caractérisé par son rayon carré moyen b_f) à l'aide de la fonction d'onde de 3 quarks dans l'état $(0s)^3$ (rayon carré moyen b_q). L'optimisation du modèle sur les déphasages de diffusion expérimentaux jusqu'à 330 MeV donne, au minimum du χ^2 , les rayons carré moyens $b_f=0.48$ $b_q=0.46$ fm et une constante de couplage $g^2/4\pi = 13$.

Deep Penetration Hadron Cascade Calculations and Comparisons to Measurements

Florica Ionescu - Farca, P.Aarnio and G.R.Stevenson
CERN, Geneva

The complex accelerator projects of the generation to come, LEP, Tevatron assume extremely high values of the proton energy (up to 10 TeV). Calculations of the energy deposition densities in matter struck by such beams are very useful in order to understand its behavior : instantaneous melting, cracking and long-term effects.

The use of a Monte Carlo hadronic-electromagnetic cascades code is described, together with comparisons to measurements and results of other Monte Carlo programmes.

THEORETISCHE PHYSIK

Etude de la diffusion multiple dans les métaux liquides et amorphes : calculs de clusters

R. Frésard et H. Beck

Institut de Physique, Université, Rue A.-L. Breguet 1, CH - 2000 Neuchâtel

Nous avons calculé la densité d'états D et la résistivité R de petits amas de diffuseurs s . Voici les résultats : $D(E)$ possède un minimum à une énergie E correspondant à 1 à 1.4 électrons par ions. Les corrections par rapport à l'approximation de Ziman, R_{Zi} , sont parfois positives, parfois négatives, et ont tendance à lisser les variations de $R_{Zi}(E)$. L'effet d'une déformation d'un amas de haute symétrie sur R (simulant les vibrations thermiques des ions), est en général plus faible que pour R_{Zi} . Le domaine d'énergie où la déformation diminue R (coefficients de température négatif) est typiquement plus grand que pour R_{Zi} pour des diffuseurs forts.

Rigorous scaling laws for Dyson measures

W.R. Schneider

Brown Boveri Research Center, 5405 Baden

In his treatment of the harmonic chain with random masses Dyson introduced a one-parameter family of probability measures, μ_s , $s > 0$, as solutions of a homogeneous integral equation whose kernel depends on the distribution of the random masses. For three classes of mass distributions rigorous scaling laws for μ_s as s tends to zero are derived. Thus, an earlier scaling approach is validated.

Eigenfunctions of the Fokker-Planck Operator and of its Adjoint

D. Ryter, Hasler AG, Research Laboratories, 3000 Bern 14

Eigenfunctions of the backward operator are readily obtained from those of the forward operator with a modified drift. This modification is determined by the stationary distribution. In the limit of low noise it remains finite in general, and it leads to the particular directions arising in the Kramers method; moreover it gives the clue for the generalization of that method to extended sets of transition points.

Variational approach to the ground state of the Heisenberg chainJ. Sólyom*Institut de Physique Théorique, Université de Lausanne, B.S.P.,
1015-Lausanne

A cluster variational approach, using increasing cluster sizes, is applied to the one-dimensional Heisenberg model with spin-1 to study the possible ground states and the phase diagram as a function of anisotropies. This method has the advantage that the phase boundaries are well defined in every step of the calculation. Extrapolation from roughly the same cluster sizes as used in finite-size scaling gives no indication for the existence of the Heisenberg singlet phase near the isotropic antiferromagnetic point.

*Permanent address: Central Research Institute for Physics,
H-1525 Budapest, P.O. Box 49, Hungary.

EXACT EXCHANGE CALCULATIONS OF ELECTRONIC PROPERTIES OF SOLIDSF. Gyqi (a) and A. Baldereschi (a,b)

(a) Inst. de Physique Appliquée, EPFL, Lausanne Switzerland

(b) Ist. di Fisica Teorica and GNSM-CNR, Univ. of Trieste, Italy

At present, most calculations of electronic structure and total energy of solids rely on local density approximations of the density functional formalism. These approximations present some serious difficulties, in particular related to self-interaction effects and excitation energies. The Hartree-Fock (HF) method takes into account exactly the effects of exchange interactions. We present a technique to perform HF calculations in solids. The exchange contributions are evaluated by special averaging techniques in the Brillouin Zone. The method is applied to the band structure and total energy of Silicon, and the results are compared to the predictions of the local density scheme.

Bound State of Two Bloch Walls in an External FieldE. Magyari and H. ThomasInstitut für Physik der Universität Basel
Klingelbergstr. 82, CH-4056 Basel, Switzerland

In a one-dimensional ferromagnet with orthorhombic magneto-crystalline anisotropy, two 180° -domain walls (π -kinks) can be bound to form a 360° domain wall (2 π -kink) by applying a magnetic field in the easy direction. We show that such a static 360° -plane domain wall with Bloch-like structure, connecting two semi-infinite domains with parallel spin orientation, is linearly stable only below a critical strength B_C of the applied field. At $B = B_C$ it becomes unstable by the occurrence of a spin component which deviates from the plane of the wall.

CONTENTS - INHALTSVERZEICHNIS

Bericht über die Frühjahrstagung der Schweiz. Physikalischen Gesellschaft,
Freiburg, 28./29. März 1985 770

PHYSIK DER KONDENSIERTEN MATERIE

KOND I: Transporteigenschaften, Phononen

Bertato, R., and Czaja, W.: Nonlinearity of the photoluminescence response of AgBr:I due to optical heating	775
van der Maas, J., and Huguenin, R.: Measurement of the temperature depen- dence of the resistive size effect in pure cadmium: the effect of sur- face reflectivity	778
Amato, A., Jaccard, D., Walker, E., et Flouquet, J.: Résistivité et pouvoir thermoélectrique du CeCu ₆ monocristallin	779
Sthioul, H., Jaccard, D., et Sierro, J.: Pouvoir thermoélectrique sous haute pression de Yb ₂ Cu ₇	779
Jaccard, D., Remenyi, G., et Flouquet, J.: Propriété de transport de UBe ₁₃	779
Huber, H., Mali, M., Roos, J., und Brinkmann, D.: Kernresonanzuntersuchung der Ag-Diffusionsprozesse im Superionenleiter Ag ₃ SBr unter hohem Druck	780
Schärli, M., Bührer, W., und Lévy, F.: Inelastische Neutronenstreuung an TiS ₂	780
Bührer, W., Luger, S., und Felsche, J.: Ueber die Wasserstoff-Bewegung im Hydroxy-Sodaliten Na ₈ (AlSiO ₄) ₆ (OH) ₂	780

KOND II: Magnetismus

Neuenschwander, J., Vogt, O., Voit, E., Wachter, P.: Elastische Eigen- schaften von Uranmonochalkogeniden	781
Schoenes, J., und Hulliger, F.: Transporteigenschaften von CeS Einkristal- len	784
Schmid, B., Fischer P., Furrer, A., und Hulliger, F.: Magnetische Phasen- diagramme von HoAs	787
Baumeler, Hp., Keller, H., Kiefl, R.F., Kündig, W., Patterson, B.D., Imazato, J., Nagamine, K., Nishiyama, K., Yamazaki, T., Grynszpan, R.I.: The Hyperfine Anomaly at a Negative Muon in Ferrromagnetic Nickel and Iron	787
Bona, G.L., Meier, F., Taborelli, M., Bucher, E., und Schmidt, P.H.: Un- tersuchung von NiMnSb mit Spinpolarisierter Photoemission	787

KOND III: Oberflächen, Grenzflächen

Cotting, T., von Känel, H.: Surface states at the sc/electrolyte inter- face studied by electroreflectance	788
Bucher, J.P., van der Klink, J.J., Buttet, J., Graetzel, M., Newson, E., Truong, T.B.: Etude et caractérisation de catalyseurs de platine par RMN	791
Brüesch, P., Müller, K., Atrens, A., Neff, H., Bennemann, K.: Der Ober- flächen-Phasenübergang am System Fe _{1-x} Cr _x /Elektrolyt: Sein Mechanismus und seine Bedeutung für die Korrosion von Stählen	792
Oelhafen, P., Wittmer, M., Tu, K.N.: Ir auf Si(100)-Oberflächen: Elek- tronenstruktur der Grenzschicht und der Ir-Silizide	792

Brunner, A.J., Oelhafen, P., Schlögl, R., Güntherodt, H.-J.: Der Einfluss von Ionenbeschuss auf die Pd-Si Grenzfläche	792
Gisler, E., Greuter, F.: AES/ISS-Profilanalyse der Korngrenzen in ZnO-Varistoren	793
Bornand, E.: Thémodésorption par chauffage non-linéaire de l'échantillon	793
Muscat, J.-P.: L'adsorption de l'hydrogène sur la surface(111)du Palladium	793

KOND IV: Dislokationen, Defekte, Metallurgie

Bidaux, J.E., Schaller, R.: Spectre de frottement intérieur du cobalt ...	794
Baur, J., Benoit, W.: Etude du fond de frottement intérieur dans des alliages dilués d'Au-Pt	794
Verger-Gaugry, J.-L., Gavillet, D., Martin, J.-L., Victoria, M.: Stabilité de la structure de bulles d'He dans l'aluminium	794
Bujard, M., Gremaud, G., Benoit, W.: Etude par mesures ultrasonores de la mobilité des dislocation	795
Millet, P., Schaller, R.: Interactions dislocations-impuretés intercalaires dans le graphite	795
Paschoud, F., Gotthardt, R.: Résistivité électrique due aux défauts d'irradiation dans l'Aluminium	795
Bonneville, J., Martin, J.L.: A Study of cross slip in the F.C.C. structure	796
Carrard, M., and Martin, J.L.: Creep of [112] Al single crystals	796
Holzschuh, E., Kündig, W., Petersen, J.W., Pixley, R.E., Stüssi, H.: Status of the Zurich \bar{v}_e -Mass Experiment	796

KOND V: Neue Materialien, Polymere, Thermodynamik

Piechotka, M., Kaldis, E.: Massenspektrometrische Untersuchung der Verdampfung von α -HgI ₂ Kristallen für γ -Strahl-Detektoren	797
Tellefsen, M., Kaldis, E., Jilek, E.: The metal (CeH ₂)-semiconductor(CeH ₃) solid solutions and the Ce-H ₂ phase diagram	801
Gallay, R., van der Klink, J.J., et Moser, J.: Etude par RPE continue et pulsée de poudres TiO ₂ :V ⁴⁺ en phases anatase et rutile	805
Perry, A.J., and Schlapbach, L.: XPS studies of HfN films	805
Kiess, H., Kobel, W., Egli, M., and Keller, R.: Mass-spectrometric investigations of (3-methylthiophene) films	805
Spychiger, H., Fritzler, B., Kaldis, E.: Bildungsenthalpien von Tm _x Se aus der Fluorverbrennungskalorimetrie als Funktion der Nichtstöchiometrie	806
Spychiger, H., Kaldis, E.: Das T-x Phasendiagramm des valenzinstabilen Tm _x Se	806

KOND VI: Supraleitung, Metalle, Varia

Mäusli, P.-A., Bloch, P., Steinemann, S.G.: Etude XPS de la chimisorption sur le Titane	807
Renaud, G.-P., Steinemann, S.G.: Propriétés magneto-elastiques des invars	811
Zweiacker, P., Rinderer, L.: Structure d'état intermédiaire dans les bicristaux supraconducteurs de première espèce	814
Cacas, J., Holguin, E., et Rinderer, L.: Mesure de la vitesse de propagation longitudinale dans les supraconducteurs impurs de type I	815
Takayama, T., and Rinderer, L.: Comment on "The theory of vortex motion in an inhomogeneous superconducting film"	815
Abukay, D., and Rinderer, L.: High T _C Multifilamentary Nb-Al wires	815

KOND VII: Elektronische Bandstruktur, optische Eigenschaften

Catellani, A., Posternak, M., and Baldereschi, A.: Electron interlayer states in hexagonal boron nitride	816
Marville, L., Andreoni, W., et Buttet, J.: Stabilité structurale d'agré-gats métalliques d'après un modèle de potentiels interatomiques	816
Andreoni, W., Upton, T.H., Martins, J.L.: Electronic properties of small silver clusters	816
Casula, F., Andreoni, W., and Maschke, K.: Size effects on the electronic structure of aluminum clusters	817
Patthey, F., Schneider, W.-D., Delley, B. et Baer, Y.: Spectroscopie de électrons à haute résolution du Ce	817
Schneider, W.-D., Delley, B., Wuilloud, E., Imer, J.-M., et Baer, Y.: Etude par spectroscopies d'électrons de composés du lanthane et du cérium	817
Riesterer, T., Schlapbach, L., Osterwalder, J.: Inverse Photoemission an PdH _x	818
Schlapbach, L., Teisseron G., Vulliet, P.: Elektronenstruktur von Hf ₂ Fe und Hf ₂ Fe-Hydrid, untersucht mit Photoemission	818
Fünfschilling, J., Zschokke-Gränacher, I.: Optisch Nicht-Lineare Eigen-schaften von Iodoform Komplexen	818

KOND VIII: Amorphe Materialien, Kristallstruktur, Defekte, Zentren

Nissen, H.-U., Ishimasa, T., Schlögl, R., Reimann, P., Güntherodt, H.-J.: Nonperiodic electron microscopic structure images of Al-Mn	819
Maglione, M., Höchli, U.T.: Relaxation dipolaire dans KTaO ₃ :Na	823
Hauert, R., Oelhafen, P., Schlögl, R., Güntherodt, H.-J.: Der Einfluss der Substrat-Elektronenstruktur auf die CO Chemisorption	827
Indlekofer, G., Oelhafen, P., Güntherodt, H.-J. : Photoemissionsuntersu-chungen an Aktinidengläsern: Co-(U-Th)-Legierungen	827
Ishimasa, T., Nissen, H.-U. Fukano, Y.: A new ordering state between crys-talline and amorphous in Ni-Cr	827
Schlögl, R., Reimann, P., Bretcher, H., Oelhafen, P., Hauert, R., Tschumi, A., Zingg, T., Schüpfer, E., Geiser, V., Güntherodt, H.-J.: Kri-stalloides Al ₆ Mn: Eine Charakterisierung	828
Schlögl, R., Geiser, V., Güntherodt, H.-J.: Amorphe Metalle: Beobachtungen zur Mikroheterogenität	828
Baumeler, Hp., Keller, H., Kiefl, R.F., Odermatt, W., Patterson, B.D., Schneider, J.W., Blazey, K.W., Estle, T.L., Rudaz, S.L., Sellschop, J.P.F., Stemmet, M.C., Schwab, C.: Electronic Changes of state of muonium defects in solids	828

ANGEWANDTE PHYSIK UND ANDERE DOMAENEN

ANDO I: Laser

Bernegger, S., Meyer, P.L., and Sigrist, M.W.: Photoacoustic detection of gaseous air pollutants with a CO laser	829
Meyer, P.L., Bernegger, S., and Sigrist, M.W.: Photoacoustic detection of gaseous air pollutants with A CO ₂ laser	833
Dupertuis, M.A., Salomaa, R.R., and Siegrist, M.R.: Phénomènes multimodes dans les lasers infrarouges lointains: compétition entre oscillation Raman, oscillation résonante et différentes transition	837

Valk, B., Hodel, W., Dätwyler, M., Weber, H.P.: Nichtlineare Effekte von UV-Pulsen eines N ₂ -Lasers in einer optischen Fiber	837
Lampart, W., Balmer, J., Roschger, E., Hares, J., Kilkenny, J.: Methode zur absoluten Zeitmessung der Röntgenemission von lasererzeugten Plasmen	827
Wolf, J.-P., v.d. Bergh, H., et Wöste, L.: Détection sélective de la pollution par LIDAR	838
 ANDO II: Engerieforschung, Umweltschutz	
Völkle, H., Huber, O.: Die Ueberwachung der Radioaktivität in der Schweiz durch die KUER	839
Murith, Ch., Völkle, H., Huber, O.: Spectrometrie Gamma "in situ" autour des centrales nucleaires suisses	843
Ribordy, L., Wicht, F., Honegger, P.: NADAM, le réseau suisse de surveillance automatique de l'irradiation ambiante: concept et premiers résultats	847
Sturny, B., Surbeck, H.: Suche nach Radiumabfällen	847
Ineichen, P.: Mesures à long terme sur des systèmes solaires: problèmes et fiabilité	847
 ANDO III: Plasmaphysik I	
Joye, B., and Nowak, S.: Radiation in the TCA tokamak with Alfvén Wave Heating	847
Duperrex, P.-A., Keller, R., Pochelon, A., Tonetti, G.: Magnetic activity in jet discharges during internal disruptions	852
de Chambrier, A., Joye, B., et Lister, J.B.: Mise en évidence de l'augmentation de l'énergie des ions en cas d'injection d'impuretés légères ...	856
Pochelon, A., and Simm, W.: The measurement of plasma electron temperature by means of the absorber foil technique in TCA	856
Weisen, H.: The phase contrast technique as an imaging diagnostic for plasma density fluctuations	856
Moret, J.-M., Gerweck, V., et Lister, J.B.: Le bilan d'énergie de TCA: analyse et simulation	857
 ANDO IV: Halbleiter, dünne Schichten, Mikroelektronik	
Baumgartner, W., and Oehler, O.: Contactless determination of the behaviour of charge carriers in semiconducting films	858
Bugmann, G., Erni, D., et Kocian, P.: Etude du contact aluminium sur le a-Si:H	861
Thuillard, M., von Allmen, M.: Laser produced cermet-like Ti-Ti _x O _{1-x} thin film structures	864
 ANDO V: Raumforschung, Kosmologie, Atmosphäre	
Debrunner, H., Flückiger, E., Golliez, F., Schubnell, M., und Sebor, G.: Zum solaren Neutronenereignis vom 3. Juni 1982	865
Flückiger, E., Scuntaro, W.: Kosmische Strahlungsmessungen als Mittel zur Untersuchung magnetosphärischer Stromsysteme	865
Joos, R.E.: Kinetische Temperaturen von Helium- und Sauerstoffionen im Sonnenwind	865

ANDO VI: Physikalische Chemie, Medizin, Biophysik

Conti, S.: Proton magnetic relaxation dispersion in fibrinogen solutions: A model for relaxation in protein solutions	866
Kocian, P., Erni, D., Bugmann, G.: Reversible und irreversible plasmache- mische Reaktionen in der elektrischen Entladung	870

ANDO VII: Materialien, Molekülphysik

Philippoz, J.-M. Calpini, B., van den Bergh, H., Monot, R.: Laser isotope separation by combining isotopically selective condensation with infra- red vibrational predissociation	871
Philippoz, J.-M., Calpini, B., Monot, R., van den Bergh, H.: The photolytic cage effect of iodine in small van der Waals clusters	875
Braichotte, D., Ernst, K., Monot, R., Philippoz, J.-M., Qiu, M., van den Bergh, H.: Laser induced surface reactions in microelectronic technology	879

ANDO VIII: Optik, Spektroskopie

Delacrétaz, G., et Wöste, L.: Spectroscopie d'agrégats alcalins ultrafroids	883
Fayet, P., et Wöste, L.: Propriétés des clusters Ag_n^+ sélectionnés en taille	887
Perry, A.J., and Schoenes, J.: The colour of Hafnium nitride films	891
Salito, S.A., and Behn, R.: High resolution submillimeter spectroscopy of N_2O and $\text{CH}_3\text{Br}^{81}$	895
Behn, R., Dupertuis, M.A., Kjelberg, I., Krug, P., Salito, M., Siegrist, M.: Erste Ergebnisse zur Kollektiven Thomson-Streuung an einem Tokamak Plasma mit Hilfe eines D_2O Ferninfrarot Lasers	895
Perrenoud, A., et Tran, M.Q.: Influence de la forme du résonateur sur les caractéristiques d'un gyrotron quasi-optique	895
Gisler, E., Bas, E.B.: A novel hybrid ISS/AES depth profiling system	896
Gisler, E., Bas, E.B.: Modellberechnung für die Peakform und das Massen- auflösungsvermögen in Ionenstreuungs-Spektren (ISS) im Vergleich mit ex- perimentellen Resultaten	896

ANDO IX: Andere Domänen

Vuillème, H.: Résonateurs en quartz: Modélisation par éléments finis	897
Muheim, J.T.: Einblick in Urzustand, Dynamik und biometrale Struktur des Universums	902

ANDO X: Plasmaphysik II

Sayasov, Yu.S.: Analytical solution of the hydrodynamical problem of ex- pansion of a thin plane target irradiated by an intensive ion beam ..	906
Philipona, R.: Lichtstreuung an Dichtefluktuationen mit stationärem CO_2 - Laser und optischem Ueberlagerungsempfang	910
Egger, E., Vaucher, B.G., Sayasov, Yu.S., und Schneider, H.: Dichte- und Magnetfeldfluktuationen in einem zylindrischen Mikrowellen-Plasma	914

ANDO XI: Schwerpunktthema: Datenaufnahme und Datenverarbeitung

Humpert, B.: Artificial intelligence: Impact on pure and applied science	915
Bizeau, C., Bourgeois, F., Dufey, J.-P., Vascotto, A.: Augmentation des taux d'acquisition et sélection des données à l'aide d'un processeur rapide en tampons	915

Lister, J.B.: Data Acquisition and Analysis in Tokamak Experiments	915
Kulik, A., Gremaud, G.: Decentralized data acquisition systems using standard interfacing	916
Quévit, D., Scartezzini, J.-L., Roecker, C.: Mesures continues du taux de renouvellement d'air dans plusieurs locaux habités	916
Waldmeyer, J.: Ein Laser-Scanning-Experiment zur ortsaufgelösten Bestimmung von Ladungsträgerlebensdauer und spezifischem Widerstand in Silizium	916
Haynes, W.J.: Multiprocessor systems in large high energy physics experiments	917

KERN- UND TEILCHENPHYSIK

Loude, J.-F.: Calculation of electrical fields and potentials in multigap wire proportional chambers with wire cathode planes	918
Czapek, G., Flückiger, A., Frei, D., Hahn, B., Hug, C., Hugentobler, E., Moser, U., Ramseyer, E., Scheidiger, H., Schlatter, P., Stucki, G., Abela, R., Renker, D., und Steiner, E.: Untersuchungen über die Eigenschaften von BGO-Kristallen	922
Czapek, G., Hahn, B., Krebs, W., und Michel, P.: Suche nach magnetischen Monopolen in der kosmischen Strahlung	922
Crawfrod, J.F., Daum, M., Frosch, R., Jost, B., Kettle, P.-R., Marshall, R.M., Minehart, R.C., and Ziock, K.O.H.: Precision measurement of the mass difference $m_{\pi^-} - m_{\pi^0}$	922
Grüebler, W., Ulbricht, J., König, V., Schmelzbach, P.A., Elsener, K., Forstner, Ch., Bittcher, M., Singy, D., Vuaridel, B., Zhang, W.Z., Chisholm, A., White, R.E., Slaus, I., Sperisen, F.: First results in the measurement of the energy dependence of the tensorpolarization t_{20} and t_{22} in elastic $\pi^+ d$ scattering by a novel method	923
Weber, P., Backenstoss, G., Izycki, M., Salvisberg, P., Steinacher, M., Weyer, H.J., Cierjacks, S., Gotta, D., Ullrich, H., Furic, M., Petkovic, T.: Absorption geladener Pionen in ${}^3\text{He}$	923
Mishra, C.S., Adams, G.S., Blanpied, G.S., Preedom, B.M. Whisnant, C.S., Egger, J.-P., Wildenthal, B.H., Breuer, H., Benton, D., Chant, N.S., Ritchie, B.G., Hoistad, B., Brown, A., Gilad, S., Redwine, R.: Study of (π^- , p) reactions on nuclei: a search for bound states	923
Borer, K. Hänni, H., Hahn, B., Hugentobler, E., Mani, P., Moning, R., Schacher, J., und Stocker, F.: Nachweis von W-Bosonen mit dem UA2-Detektor am CERN $p\bar{p}$ -collider	924
Borer, K., Hänni, H., Hahn, B., Mani, P., Moning, R., Schacher, J., und Stocker, F.: Beobachtung von Elektronenpaaren mit invariante Masse $\geq 12 \text{ GeV}/c^2$ im UA2-Experiment am Cern $p\bar{p}$ -collider	924
Bienz, F., Bergem, P., Boschung, M., Jacot-Guillarmod, R., Piller, G., Schaller, L.A., Schellenberg, L., Schneuwly, H., Torelli, G., Reichard, W.: Transfert de muons de l'hydrogène sur l'argon et l'hélium	924
d'Achard van Enschut, J.F.M., David, P., Duinker, W., Gugler, C., Hartfiel, J., Janszen, H., Konijn, J., Krogulski, T., de Laat, C.T.A.M., Mayer-Kuckuk, T., von Mutius, R., Petitjean, C., Polikanov, S.M., Reist, H.W., Schaller, L.A., Schellenberg, L., Taal, A.: Etude des rayons-X muoniques et pioniques du ${}^{237}\text{Np}$	925

Bovet, E., Antonuk, L., Egger, J.-P., Fiorucci, G., Gabathuler, K., and Gimlett, J.: A new determination of the π^-H and π^-D 2P-1S strong interaction shifts using crystal diffraction	925
Backenstoss, G., Findeisen, Ch., Kuzminsky, J., Repond, J., Tauscher, L., and Williams, C.: π^0 and η spectroscopy at LEAR	925
Bagnoud, X.: Evaluation de la dimension du coeur de quarks du nucléon à l'aide d'un modèle d'interaction NN	926
Ionescu-Farca, F., Aarnio, P., and Stevenson, G.R.: Deep penetration hadron cascade calculations and comparisons to measurements	926

THEORETISCHE PHYSIK

Frésard, R., Beck, H.: Etude de la diffusion multiple dans les métaux liquides et amorphes: calculs de clusters	927
Schneider, W.R.: Rigorous scaling laws for Dyson measures	927
Ryter, D.: Eigenfunctions of the Fokker-Planck operator and of its adjoint	927
Sólyom, J.: Variational approach to the ground state of the Heisenberg chain	928
Gygi, F., and Baldereschi, A.: Exact exchange calculations of electronic properties of solids	928
Magyari, E., and Thomas, H.: Bound state of two Bloch walls in an external field	928