

Zeitschrift: Helvetica Physica Acta
Band: 60 (1987)
Heft: 2

Vereinsnachrichten: Bericht über die Herbsttagung der Schweizerischen Physikalischen Gesellschaft an der Universität Bern vom 9. und 10. Oktober 1986

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: 29.11.2025

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

BERICHT UEBER DIE HERBSTTAGUNG DER SCHWEIZERISCHEN PHYSIKALISCHEN
GESELLSCHAFT AN DER UNIVERSITAET BERN vom 9. UND 10. OKTOBER 1986

I. Administrativer Teil

Vorstand der SPG:

Prof. P. Minkowski	Präsident
Prof. S. Steinemann	Vizepräsident
Prof. P. Grieder	Sekretär
Dr. H. Hänni	Kassier
Prof. L. Schaller	Teilchen-, Astro- + Kernphysik
Prof. P. Martinoli	Kondensierte Materie
Dr. M. Siegrist	Angewandte Physik
Dr. D. Ryter	Theoretische Physik
Prof. R. Dändliker	Wissenschaftspolitik
Dr. Th.H. Schucan	Helvetica Physica Acta
Prof. I. Zschokke	I.U.P.A.P.

Rechnungsrevisoren:

PD Dr. J. Schacher
PD Dr. J. Gasser

Stellenvermittlung der SPG

Prof. Dr. Fritz K. Kneubühl
Labor f. Quantenelektronik
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
Institut für Theoretische Physik der Universität Bern
Sidlerstrasse 5
CH-3012 Bern

Tel. 031/65 86 24 / 65 44 17

Neue Mitglieder (seit dem 1. März 1986)

CHAVDA Lakha, CURTINS Hermann, DEGIORGI Leonardo, DOMINGO John, EICHLER Ralph, FEDERSPIEL Andrea, FISCHER Walter E., GASSER Jürg, GIENAL Ivo, HEINTZE Michael, ISSLER Dieter, JACCARD Samuel, JORDAN Paul, JOST Stephan B., KOEPPPEL Thomas, LAERMER Franz, MARABELLI Franco, MONING Renate, RACINE Georges-André, ROD Serge, SHAH Arvind, SIMM Christian, SOARES Vitorvani, SCHEIDIGER Hans, SCHMIDT Martin, STRAUMANN Norbert, WEISEN Henri, WYLER Daniel

Die Adressen können beim Sekretariat verlangt werden.

Damit zählt unsere Gesellschaft zurzeit 1260 Einzelmitglieder, 8 Gesellschaften und 14 Bibliotheken als Kollektivmitglieder.

Die Generalversammlung fand am 9. Oktober 1986 in Bern statt.

Protokoll

Anwesend: 25 Personen

1. Protokoll der Generalversammlung vom 10. April 1986 in Neuenburg

Das Protokoll wird ohne Einwände genehmigt.

2. Mitteilungen des Vorstandes

- Der Vorstand wird allen Mitgliedern in einem Rundschreiben Vorschläge zur Revision des HPA-Journals unterbreiten, die sich auf folgende Punkte beziehen
 - Abstracts sowie das Protokoll der Generalversammlung sollen nicht mehr in der HPA erscheinen, sondern nur noch im Programmheft der Gesellschaft.
 - Kurzbeiträge von 1 bis 4 Seiten oder mehr sollen kostenmässig neu geregelt werden und mit Absprache des HPA-Komitees bei Bedarf einem Referee unterstellt werden unter der Aufsicht der Sektionspräsidenten.

Das Resultat der Mitglieder-Umfrage wird voraussichtlich an der Frühjahrs-Generalversammlung diskutiert und darüber abgestimmt werden.

- Frühjahrstagung vom 18. - 20. 3.1987 an der Universität Zürich-Irchel zusammen mit den Sektionen Elementarteilchenphysik der Deutschen und Oesterreichischen Physikalischen Gesellschaften (voraussichtlich 200 Beiträge). Die anderen Sektionen haben eventuell eine kürzere Tagungsdauer.
Lokales Organisationskomitee: HH. Prof. W. Kündig und R. Engfer von der Universität Zürich

Aus verschiedenen Gründen hat die österreichische Physikalische Gesellschaft darauf verzichtet bei dieser Tagung in globo mit dabei zu sein. Eine gemeinsame Veranstaltung mit dieser Gesellschaft wird auf einen späteren Zeitpunkt verschoben.

- Mutationen

- Anstelle des zurücktretenden Prof. P. Martinoli wird Prof. Y. Baer, Universität Neuenburg, als Fachpräsident der Sektion Festkörperphysik (KOND) einstimmig gewählt.

- Dr. M. Siegrist, Fachpräsident der Sektion Angewandte Physik wird für ein weiteres Jahr in seinem Amt bestätigt.
- Prof. P. Grieder orientiert über den Kauf des PC-Computers der für ca. Fr. 15'000.- einschliesslich Software angeschafft werden konnte. Der Standort wird bei der Sekretärin Frau R. Berger sein.

3. Mitteilungen der Fachgruppen

- Theorie

In dieser Sektion will man versuchen durch strukturierte und anspruchsvollere Sessionen mehr Theoretiker zu gewinnen.

4. Mitteilungen der Kommissionspräsidenten

- Katalog 1985
Der Versand dieses Katalogs wird Ende Oktober 1986 erfolgen. Die verspätete Auslieferung dieses Dokumentes ist auf die sehr grosse Arbeit, die geleistet werden musste, zurückzuführen.
- I.U.P.A.P.
Die Jahresbeiträge der Schweiz von \$ 4000.- zu Lasten des Budgets der Schweizerischen Naturforschenden Gesellschaft (SNG) werden für die Jahre 1986 - 87 voll bezahlt. Die Präsidentin Prof. I. Zschokke betont dass angesichts der Bedeutung der Schweizerischen Physik dieser Beitrag bescheiden ist. In der Senatsitzung 1985 der SNG wurde beschlossen, dass Jahresbeiträge an internationale Unionen nicht mehr als 8% des budgetierten jährlichen Gesamtbeitrages der SNG ausmachen sollen.

5. Verschiedenes

- Panel-Diskussion
Zur angesetzten Panel-Diskussion werden verschiedene Bedenken geäussert. Nach welchen Kriterien wurden die Fachvertreter ausgewählt? Ist es Sache der SPG, in diesem Rahmen auf den Gang der Dinge Einfluss zu nehmen? Der Präsident erwidert, dass es wichtig sei, etwas zu unternehmen. Wichtig bei dieser Diskussion sind die Meinungen der Diskussionsteilnehmer und die Definition der Grossprojekte.

Bern, 22.10.86

Der Präsident:
P. Minkowski

Der Sekretär:
P. Grieder

sekundär; primär ist die wissenschaftliche Qualität des Projekts neben der Zusammenarbeit allgemein.

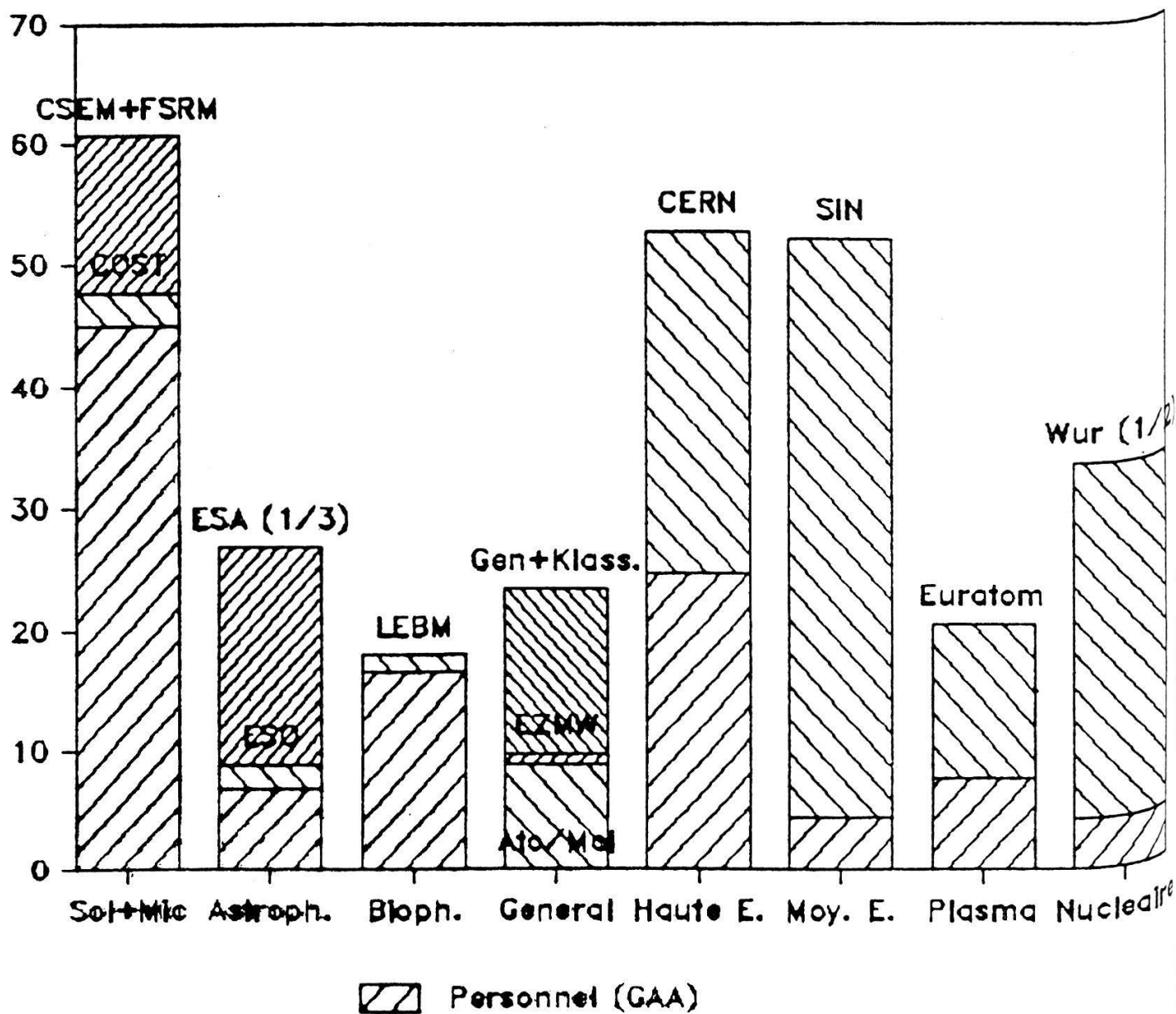
Ein Grossprojekt ist somit keineswegs Voraussetzung für bahnbrechende Entdeckungen, es trachtet aber naturgemäss danach, Neuland zu betreten.

Die Diskussion hat zunächst zwei Ziele:

- Erarbeiten einer konsensfähigen Stellungnahme durch die Teilnehmer (nicht nur die "Panelists") bezüglich der wissenschaftspolitischen Fragen, die den Problemkreis SIN-EIR betreffen.
- Fortführen und Erweitern der Diskussion insbesondere der nicht SIN-EIR bezogenen Projekte.

Peter Minkowski

Frais estimés par Domaine



Sources: Die Beteiligung der Schweiz an der wissenschaftlichen
Forschung (BBW Aug 1985)
Grobe Abschätzung der Aufwendungen (SSP 1983)
NZZ : 215: 17 Sept, Ein nat. Lab. an der Aare

Die B-Mesonen Fabrik (BMF), eine mögliche zukünftige Maschine am SIN.

(R. Eichler, Institut für Mittelenergiephysik der ETHZ)

Wir schlagen als zukünftige Maschine für das SIN einen Elektronen-Positronen-speicherring vor zum Studium von Mesonen und Baryonen mit b-Quarks. Es wird eine Luminosität von grösser $5 \cdot 10^{32} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ in der Energieregion der T(4S) bis T(5S) Resonanzen angestrebt.

Der Speicherring soll zwei Wechselwirkungszonen haben an denen jeweils eine Gruppe von 50-80 Physikern experimentiert. Die Kosten für Injektor inklusive Positronenquelle, Speicherring, Gebäude und Infrastruktur sind basierend auf DESY-Erfahrung von Fachleuten auf 125 M DM geschätzt worden. Für einen neuen Detektor benötigt man zusätzlich ca. 40 M SFr. (international finanziert). Für die zweite Wechselwirkungszone kann man zumindest anfänglich einen existierenden Detektor von DORIS (DESY) oder LEAR (CERN) benutzen.

Die erzeugte Synchrotronstrahlung in den Ablenk- und Wigglermagneten lässt sich parasitär für Experimente der Festkörper- und Oberflächenphysik benutzen. Es empfiehlt sich im Hinblick auf ein technisches Proposal der BMF die Frage zu studieren, ob ein zusätzlicher Ring optimiert für Synchrotronstrahlungsbenutzer mit zugehörigen Experimentierareal und Instrumenten als Ergänzung zur europäischen Quelle (ESRF) in Grenoble für die schweizer Festkörperphysiker nicht eine attraktive Maschine wäre. Eine ganz grobe Abschätzung hat ergeben, dass so ein Ring nur ca. 10 M SFr. zusätzlich kosten würde. Für die nötigen Instrumente (Undulatoren, Wiggler, Spektrometer) für 5 Sekundärstrahlen mit Experimentierhalle müssten nochmals ca. 20 M SFr. ausgegeben werden.

Das Projekt einer B-Mesonen Fabrik erlaubt es, eine Vielzahl von modernen physikalischen Fragestellungen zu bearbeiten und bedeutet somit auch eine grosse Zahl verschiedener Diplom- und Doktorarbeitsthemen.

Particle-Physics at the BMF

(D. Wyler, Institut für theoretische Physik der ETHZ)

The proposed BMF allows a rich study of both strong and electroweak physics; in particular the expected high luminosity enables one to probe physics beyond the standard model.

As to strong interactions the study of the bound states $b\bar{b}$; $b\bar{d}$, $b\bar{s}$; bqq ..; (i.e. levels, decay width ...) yields information on QCD in the region between strong and weak coupling regimes and thus possibly a better understanding of QCD effects in weak processes. The decays of c and τ may probe the interesting 1-1.6 GeV region (glueballs!), as the success with the A_1 shows.

Since the BMF is a copious source of τ -leptons, their weak interaction properties can be tested: space-time structure of the current (V-A?), rare decay modes; furthermore a relevant bound on the mass of the τ -neutrino can be obtained.

The precise study of the weak interactions of the quarks may give for the first time a very precise determination of some of the unknown parameters of the standard model and thus contribute to the further understanding of a basic theory. Numerical estimates show that a relevant test of the present 3-generation standard model is feasible at the BMF.

In particular, CP-violation, so far only seen in the K-system and still mysterious, can only be seen again in the b-system. Present estimates indicate that the effect might be observable. Also, the b-system offers an excellent possibility to test for rare decays, such as $b \rightarrow \tau\tau$... as a signal of new interactions.

The recent important findings in particle physics come mainly from very large installations; but with the required improved accuracy successful "small" experiments, tend to become bigger. The BMF is a very good chance to do front-physics at relatively low costs.

Die European Synchrotron Radiation Facility ESRF in Grenoble

P. Zinsli, Bundesamt für Bildung und Wissenschaft, Bern

Während 20 Jahren nach ihrer Entdeckung nur als Belästigung angesehen, erkannte man anfangs der 70-iger Jahre die grossen Vorteile der Synchrotron-Strahlung, insbesondere den breiten Spektralbereich, die hohe spektrale Leuchtdichte sowie die günstige Polarisierung und Zeitstruktur.

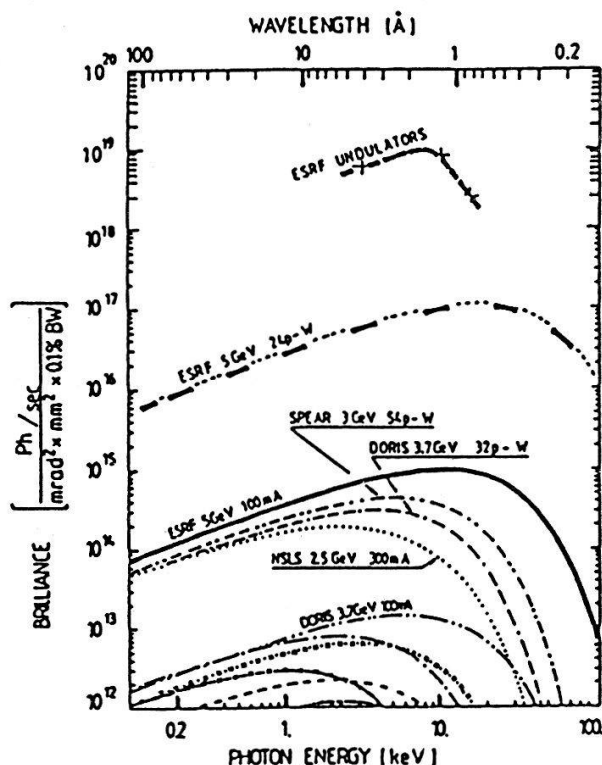
Allgemein kann man heute sagen, dass überall dort, wo in Experimenten Photonen vom Vakuum-Ultraviolett bis zum Röntgengebiet eingesetzt werden (z.B. Photoemission, Röntgenabsorption und -Beugung), Synchrotron-Strahlung anderen Lichtquellen - teils weit - überlegen ist.

Synchrotron - Quellen sind heute - und erst recht in Zukunft - ein notwendiges Instrument der Erforschung kondensierter Materie, insbesondere der Oberflächen-/Grenzflächen-Physik. Anwender finden sich aber auch in der Biologie (Röntgenmikroskopie lebender Zellen, ev. Holographie), Chemie (Katalysatorstudien mit EXAFS), Medizin (Angiographie), Materialwissenschaft/Mikrotechnik (Lithographie bei 0.25 μ) etc.; daher hat sich auch die Industrie im Ausland stark in der Nutzung der Synchrotron-Strahlung engagiert (z.B. 1/3 der Nutzung von BESSY).

Die nächste Generation von Synchrotron-Quellen, welche nicht nur parasitär Beschleuniger-Anlagen der Hochenergiephysik nutzen werden, wird auf höhere Energien und viel höhere Intensitäten optimiert sein. In den USA erhielt ein solches 6 GeV-Instrument durch eine Materialforschungs-Expertengruppe (Seitz-Panel, 1984) erste Priorität.

Europa plant die ESRF, ein Instrument nach neuester Auslegung (basierend auf Wigglern und Undulatoren) bei 5 bis 6 GeV, für Experimente, welche an heutigen Instrumenten nicht möglich sind.

Nach Meinung von Fachleuten wird die ESRF in einer Reihe von Experimenten einen qualitativen Sprung erlauben und das weltweit führende Instrument der 90-iger Jahre sein. Die angestrebte Leuchtdichte (siehe Figur) wird höchste Auflösung, kleinste Probenabmessungen und tiefe Nachweisgrenzen (Verdünnung, schwache Effekte) möglich machen.



LA PHYSIQUE DES PARTICULES

M. Bourquin

Département de physique Nucléaire et Corpusculaire
Université de Genève

Résumé

La physique des particules a comme objectif principal l'étude des constituants ultimes de la matière et des forces qui les lient. Une description unifiée devrait être trouvée. Pendant cette dernière décade, de grands progrès expérimentaux et théoriques ont été obtenus. Le modèle standard contient 6 quarks, 6 leptons et leurs antiparticules; les forces électromagnétiques et faibles unifiées sont transmises par 4 bosons (photon, Z^0 , $W^\pm$) qui ont été observés. Les forces nucléaires fortes sont transmises par 8 "gluons" qui ont aussi été mis en évidence expérimentalement. En fait, il est tout à fait remarquable que ce modèle standard soit compatible avec toutes les observations de la physique nucléaire et de la physique des particules.

Cependant, certaines hypothèses du modèle ne sont pas comprises quant à la nature des quarks et des leptons, la grande différence de masse entre le photon et les bosons intermédiaires, etc. Ainsi il est essentiel de rechercher un "boson de Higgs" qui pourrait expliquer la brisure de symétrie, ou bien de montrer que ce modèle peut être pris en défaut. Pour cela, des particules de très hautes énergies sont nécessaires, qui peuvent, d'une part, produire des états de masses élevées et, d'autre part, résoudre d'éventuels constituants à une plus petite échelle. Ces raisons justifient la construction d'accélérateurs d'énergies de plus en plus élevées, qui doivent par conséquent se concentrer dans un nombre de plus en plus restreint de laboratoires.

Grâce à une bonne concertation internationale, les grandes installations en cours de construction offriront des moyens complémentaires: collisionneurs $p\bar{p}$ à Fermilab, e^+e^- à 100 GeV au SLAC et à 200 GeV au CERN, e^-p à DESY. Pour l'avenir, plusieurs projets sont en discussion: collisionneurs pp ou $p\bar{p}$ aux USA ou au CERN, e^-p au CERN, ainsi que des accélérateurs linéaires à électrons. La réalisation de ces nouveaux projets demande le développement de nouvelles technologies et une vaste coopération internationale. Les priorités sont discutées en termes spécifiques au sein de plusieurs organisations représentant la physique des particules et des nouvelles technologies.

Toutefois, certaines questions peuvent être mieux étudiées avec d'autres installations existantes ou à créer, telles que des faisceaux d'ions O^{16} , d'hypérons ou de $\bar{p}$ à basse énergie, des laboratoires souterrains sans accélérateur, ou des collisionneurs e^+e^- au seuil de production des mésons B pour l'étude de la violation de CP et de leurs désintégrations rares.

En ce qui concerne la Suisse, il apparaît donc que tout nouveau projet demandera une coopération internationale. Il faudra considérer le nombre de physiciens participant, les interactions avec les hautes écoles, une répartition équitable des moyens et responsabilités entre les écoles fédérales et les universités. Il faudra aussi faire preuve de réalisme en décidant quels projets doivent être arrêtés et faire place aux installations projetées.

HOCHENERGIE - ASTROPHYSIK

Peter K. F. Grieder, Physikalisches Institut, Universität Bern

Die Hochenergie-Astrophysik kann als Teilgebiet der Nicht-Beschleuniger Hochenergiephysik betrachtet werden. Dieser im Gegensatz zum Ausland in der Schweiz nur wenig bearbeitete Wissenschaftszweig wurde durch den Autor an der Generalversammlung der SPG im Frühjahr 1986 in einem Kurzreferat umrissen. Im folgenden wird das bedeutendste internationale Grossprojekt der Hochenergie-Astrophysik, Projekt DUMAND (Deep Underwater Muon And Neutrino Detector), zu dessen Initianten der Autor gehört, kurz vorgestellt und sein Status zusammengefasst. Ein detaillierter Artikel in englischer Sprache ist erhältlich, ein deutschsprachiger in Vorbereitung.

DUMAND ist ein gigantisches Detektorsystem mit insgesamt 756 hochentwickelten optischen Sensormodulen, die in Form einer dreidimensionalen Matrix innerhalb eines Parallelepipeds von $250 \times 250 \times 500 \text{ m}^3$ bei Hawaii in einer Tiefe von rund 5 km im Pazifik installiert werden soll. Das System wird in der Lage sein, hochenergetische Myonen der kosmischen Strahlung und energiereiche myonische Neutrino terrestrischen wie extraterrestrischen (ET) Ursprungs, die innerhalb oder in der Umgebung der Detektorenmatrix ein nachweisbares Myon erzeugen, zu registrieren, die Trajektorien zu rekonstruieren und ihre Energie approximativ zu bestimmen. Der Nachweis erfolgt in jedem Fall mit Hilfe der Cerenkovstrahlung der Myonen im Wasser. Die Detektorenmatrix umschliesst 33 Megatonnen, die effektive Detektorenmasse für 2 TeV Neutrino ist 0.5 Gigatonnen und der minimal detektierbare ET Neutrinofluss beträgt $2 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ bei $E_\nu = 1 \text{ TeV}$.

Die wichtigsten wissenschaftlichen Ziele des DUMAND Projekts sind: 1.) Suche nach und Nachweis von hochenergetischen extraterrestrischen myonischen Neutrinoquellen zwecks Identifizierung von Objekten, in denen noch energiereichere hadronische Prozesse ablaufen, die als Injektoren für die kosmische Ultrastrahlung in Frage kommen könnten. 2.) Untersuchung der Myonenkomponente der kosmischen Strahlung mit $E_\mu \geq 3 \text{ TeV}$, zur Bestimmung der chemischen Zusammensetzung der Primärstrahlung und der Eigenschaften ihrer Wechselwirkung in der Atmosphäre im Energiebereich von 10^2 TeV bis 10^5 TeV . 3.) Studium von Myon- und Neutrinoreaktionen bei Energien weit über denjenigen der zukünftigen Supercollider.

DUMAND wird im Rahmen der "International DUMAND Collaboration" gebaut und betrieben werden. "Feasibility study", Modul- und Systementwicklung sind abgeschlossen. Ein "Short Prototype String" System mit 7 Modulen ist fertiggestellt und wird in Kürze zum Einsatz gelangen. Als nächste Stufe ist der Bau eines Triads mit ET Neutrino Nachweisfähigkeit geplant. Das Projekt wird vorwiegend durch DOE, NSF, staatliche und private japanische Organisationen getragen. Unterstützung durch den schweiz. Nationalfonds erfolgte bisher bedauerlicherweise nur am Rande, umso beachtlicher sind deshalb Beiträge aus der schweiz. Industrie für dieses zukunftsorientierte mit neuer Spitzentechnologie hochbestückte Projekt der Grundlagenforschung.

Computerunterstützte Forschung in theoretischer Physik
 =====
 P. Minkowski, ITP, Universität Bern

Es seien zuerst charakteristische aktuelle Fragestellungen ausgewählt, deren mathematisch exakte Behandlung - sie ist nach wie vor das Ziel jeder theoretischen Analyse - grösstenteils ausser Reichweite ist, die aber durch analytische wie vermehrt auch numerische Approximationsverfahren relevante Teilantworten erlauben.

- 1) Statistische Quantenmechanik: Ising Modell ($\dim \geq 2$), Potts Modell, Spin Gläser, Phasenübergänge und kritische Exponenten
- 2) Relativistische Quantenfeldtheorie: QED, QCD (Kontinuum- und Gitterapproximationen), elektroschwache Wechselwirkungen, GUT, supersymmetrische Modelle, nichtlineare Sigma-Modelle ($d=2$)
- 3) Chaotische (klassische) Systeme: $dy/dt = f(y)$; $y=(y_1, \dots, y_n)$
 $f=(f_1, \dots, f_n)$
 Umgebung geschlossener Bahnen, Ergodenprobleme, Dreikörperproblem
- 4) Quantengravitation: schwarzes Loch, Sternkollaps, Stabilitätsprobleme, Supergravitation ($d=4$, $d > 4$), Superstrings

Die oben beschriebenen Gebiete erarbeiten Methoden, die in mehreren Sparten der Physik ihre Anwendung finden: Festkörperphysik, Plasmaphysik, Kerne und Moleküle, Astrophysik.

In diesem Zusammenhang schlage ich folgendes Grossprojekt vor:

Entwicklung computerunterstützter Methoden der theoretischen Physik

Das Projekt soll erlauben, eine Arbeitsgruppe mit theoretischen Physikern (eventuell eine multidisziplinäre Arbeitsgruppe) zu bilden mit folgendem Aufgabenbereich:

- Erarbeiten problemorientierter Rechenalgorithmen
- aktive Forschung in Physik (computerunterstützt)
- Erarbeiten von Richtlinien für "dedicated computer systems"
- Erweiterung der verwendeten Sprache unter Einbezug der bestehenden mathematischen Konvention und der menschlichen Sprache
- Entwicklung "künstlicher Intelligenz" im Sinne der Lösung der physikalischen Fragestellung.

Die genannte Arbeitsgruppe sollte in einem bestehenden oder zu schaffenden Rechenzentrum integriert sein, wofür zum Beispiel das Schweizer Supercomputerzentrum an der ETH-Z die Infrastruktur bilden könnte.

Die Realisierung eines solchen Projekts würde die gegenwärtig sehr angespannte Stellensituation für vorhandene, qualifizierte Nachwuchsforscher entlasten.

CHAMPS MAGNETIQUES INTENSES

Øystein Fischer

Département de physique de la Matière Condensée
Université de Genève

La réalisation de champs magnétiques considérablement plus élevés que ceux dont nous disposons aujourd'hui, est un des défis importants pour la prochaine décennie. La concrétisation d'un tel projet intéresserait pratiquement tous les domaines importants de la physique, ainsi que bien d'autres, comme la chimie et la biologie. Un développement pour atteindre de plus hauts champs doit passer par une amélioration considérable de la performance actuelle des aimants supraconducteurs. La limite pratique, d'environ 15 Tesla de ces derniers, est avant tout liée au fait que les propriétés des matériaux supraconducteurs actuellement utilisés (NbTi et Nb_3Sn) sont limitées par le champ magnétique lui-même. (Le plus haut champ jamais réalisé par un aimant supraconducteur est 18.1 Tesla (au Japon)). Or, il existe plusieurs matériaux qui permettraient en principe d'aller bien au-delà de cette limite. Parmi ceux-ci, citons PbMo_6S_8 , SnMo_6S_8 , Nb_3Al , Nb_3Ge , et NbN . Cependant avant de construire des aimants avec ces matériaux, il est nécessaire de développer ces derniers sous forme de fils pouvant supporter une haute densité de courant électrique.

La Suisse possède avec les Universités, les Ecoles Polytechniques et le SIN une expertise mondialement reconnue dans les domaines des matériaux supraconducteurs et la supraconductivité appliquée. En plus, l'industrie Suisse possède une expertise considérable dans la réalisation d'aimants supraconducteurs. La situation actuelle représente une occasion remarquable pour la Suisse de pouvoir une fois de plus, contribuer de manière très significative au développement de la science au niveau international et en même temps prendre une avance dans le domaine de la technologie des champs magnétiques intenses.

La première étape dans un tel programme pourrait être d'établir un effort coordonné au niveau national en vue de développer des matériaux supraconducteurs pour des champs magnétiques dans le domaine de 20 à 30 Tesla et de réaliser des bobines à tester dans des champs de cet ordre. Un premier pas dans ce sens a déjà été franchi avec le programme Eureka 96 qui vise le développement de PbMo_6S_8 pour des champs de 20 Tesla. Le projet proposé ici viserait un effort plus important pour explorer les limites en champ et courant de ce composé et certains des autres matériaux mentionnés ci-dessus, en vue de réaliser des aimants supraconducteurs dans le domaine de 20 à 30 Tesla. Il s'agira d'un projet de taille moyenne dont le coût sera situé entre celui d'un grand projet et celui d'un groupe universitaire.

PROJET POUR LA CREATION D'UN
INSTITUT ROMAND DE RECHERCHE NUMERIQUE SUR LES MATERIAUX
(IRRMA)

Le développement de nouvelles approches théoriques et l'apparition d'ordinateurs toujours plus puissants a permis à la physique des matériaux de s'étendre bien au-delà de ses limites analytiques. Il est maintenant possible de prédire ou expliquer différentes propriétés physiques des matériaux au moyen de la recherche numérique. Cependant, les moyens existants ne permettent pas d'aborder de manière satisfaisante les propriétés des matériaux hors de l'état fondamental et à température finie, ainsi que les propriétés de systèmes complexes comme les alliages et les surfaces. La solution de ces problèmes nécessite de raffiner les méthodes existantes et d'en développer de nouvelles.

Un effort considérable en recherche numérique existe déjà en Suisse romande (Lausanne, Genève, Neuchâtel). Cependant, il serait souhaitable de coordonner et d'étendre ces efforts afin de mieux utiliser le savoir, les moyens informatiques, et surtout le potentiel des chercheurs compétents. Dans ce but, nous proposons la création d'un institut de recherche interuniversitaire en Suisse romande. L'institut fournirait le cadre pour réaliser des projets communs de recherche numérique sur les matériaux, étendre la recherche vers de nouvelles directions, organiser des activités de post-formation et pour gérer les problèmes informatiques communs. L'institut devra se doter de postes fixes ou temporaires, ainsi que d'un parc d'appareils informatiques. L'institut devra aussi attirer des chercheurs de l'étranger et faciliter la collaboration au niveau international. Même de taille relativement modeste, un tel institut permettrait de surmonter les obstacles inhérents à la dimension des groupes de recherche numérique déjà existants en Suisse romande et d'atteindre la masse critique.

ANGEWANDTE PHYSIK UND ANDERE DOMAENEN

Photovoltaik I

High rate deposition of amorphous silicon: An overview and new results.H.Curtins, N.Wyrsch, M.Favre and A.V.Shah

Institut de Microtechnique, Université de Neuchatel, 2000 NEUCHATEL

Progress in the production of low-cost/high-performance silicon solar cells and other thin film devices (e.g. photoreceptors) will primarily depend on the development of technologies yielding high film deposition rates combined with a high quality base material. We will discuss a new, modified silane glow-discharge decomposition method by which typical growth rates between 20-25 Å/sec are obtained, i.e. a factor of ~5 higher than observed in conventional glow-discharge systems. The films have an excellent quality and show defect densities $< 8 \times 10^{15}/\text{cm}^3$ and Urbach edge energies $E_0 < 60$ meV as determined by photodeflection spectroscopy.

nc-Si and a-Si: Kinetics and Mechanism of the Deposition and the Control of the Material Properties: A Review of Recent ResultsS.Veprek, M.Konuma, F.-A.Sarott, K.Ensslen, H.Curtins⁺ and Z.Iqbal⁺⁺

Institute of Inorganic Chemistry, University of Zürich, 8057 Zürich

The kinetics of the gas phase decomposition of silane has been studied by means of chemical relaxation mass spectrometry. It is shown that the electron impact fragmentation of silane into SiH_2 and H_2 is the dominant process. Optimum deposition conditions and the reactor design are discussed with respect to the results of latest studies of the surface processes. The understanding of these processes allows one a precise control of the properties of the material as it will be shown by a number of examples.

⁺ Univ. Neuchatel, ⁺⁺ Allied Chemicals, Morristown, USA

Particularités de la déposition anodique de a-Si:H dans la lueur négative d'un plasma DC de Silane / Hélium.G. Bugmann, D. Erni et P. Kocian,
Institut de Physique Appliquée, EPFL, 1015-Lausanne

Le taux de dissociation du Silane, le taux de déposition et les profils d'émission optique (Si, He et H) ont été mesurés en fonction de la distance interélectrodes. Les résultats, interprétés en termes de diffusion de radicaux, montrent l'inhomogénéité spatiale des processus de dissociation. L'influence du plasma sur la croissance des couches sera discutée, de même que les phénomènes transitoires tels que : température du substrat, composition du gaz et état de surface des électrodes. Les derniers résultats quant aux cellules solaires produites seront présentés.

Laser und Laser-Anwendungen (Sensoren)

LOADING OF THE ICF-PELLET INDUCED BY THE ION BEAMS AND FEASIBILITY OF THE ION-DRIVEN ICF-CONCEPT

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

According to the ion-driven ICF-concept, based on the idea of using of a spherical, freely falling pellet, the ions must enter the pellet from different sides losing thereby their energy in its high - Z tamper shell (see e.g. [1]). In the following we will report results of investigation of a problem arising in this connection - that of the loading of the pellet induced by the ion beams. (This problem received, apparently, little attention so far; first estimates of the role of this effect were made, probably, in [2], [3]). Simple considerations show that irradiation of a pellet by ion beams must necessarily lead to accumulation of a strong positive charge inside of the pellet, at least in case the light ions are used as drivers. Even if one assumes that the positive charge of the beam ions is completely neutralized by comoving electrons (this assumption is used throughout in the following) the ions will enter the pellet exempt to a substantial degree from these comoving electrons which must be back-scattered from high Z metal shell of the pellet. Velocity of the comoving electrons must be equal to the velocity v_b of the ions in the beam, and, hence, the energy W_e of these electrons must be equal to $W_e = m_e W_b / m_b$ where m_e , m_b are masses of the electrons and the beam ions and W_b is the energy of the ions. For $W_b = 5$ MeV (protons) we get $W_e = 2,7$ keV. As numerous experiments show (see e.g. [4]) electrons of such energies experience a very appreciable back-scattering from the high-Z metal targets. The same conclusion is valid for back-scattering of the electrons from a dense plasma arising from the metal shell of the pellet shortly after start of the ion pulse. According to the theory of Everhart [4] the back-scattering coefficient η for lead dense plasma for W_e of the order of a few KeV must be equal to $\eta = 0,75$. On the other hand, beam ions do not experience a back scattering. Thus, at the start of the ion pulse the flux of the ions $n_b v_b$ (n_b is the density of ions or comoving electrons in the beam) entering the pellet exceeds essentially the flux of the comoving electrons $(1-\eta)n_b v_b$ entering there. This leads, of course, to accumulation of the back-scattered electrons at the pellet surface which experience a reabsorp-

tion in the pellet. The density n_o at the pellet surface of the back-scattered electrons arising in stationary state, reached very quickly after the start of the ion pulse, is defined by the condition of equality of the flux $n_b v_b$ of positive ion charges and the flux $(1-\eta) (n_b + n_o) v_b$ of the negative electron charges. This gives the formula for the stationary density of the back-scattered electrons $n_o = \eta n_b / (1-\eta)$. For $\eta \ll 1$ we have also $n_o = \eta n_b$. This last result can be justified in rigorous way as follows. The distribution function f_e of the electrons outside of the pellet (comprising both electrons comoving with the ion beam, and the back-scattered electrons) can be represented for small η in the form $f_e = f_{eo} + f$ where f_{eo} is the distribution function of electrons in the beam and f is the correction due to the back-scattering. For $\eta \ll 1$ one can assume $f \ll f_{eo}$. The electric field E arising as a result of the back-scattering around of the pellet can be assumed for $\eta \ll 1$ to be a small quantity. As the back scattered electrons must be concentrated in a thin layer at the pellet surface we can consider the problem as a one-dimensional one. Thus, the Boltzmann equation describing distribution of the back-scattered electrons in the stationary state has the form

$$v_x \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{eE}{m_e} \frac{\partial f_{eo}}{\partial v_x} = -\nu f, \quad f = f(x, \vec{v}) \quad (1)$$

where ν is a collision frequency, x is a coordinate counted perpendicular to the pellet surface ($x = 0$) and $\vec{v}$ is the electron velocity. The Poisson equation can be represented similarly in the form

$$\frac{\partial E}{\partial x} = -4\pi e \int f d\vec{v} - E_o \delta^+(x) \quad (2)$$

where E_o is the field at the pellet surface and $\int_0^\infty \delta^+(x) = 1$. The term $E_o \delta^+(x)$ takes into account the presence of the positive charges at the pellet surface.

The boundary condition at the pellet surface, $x = 0$, can be formulated as follows: $v_x f(0, \vec{v}) = \int w(\vec{v}, \vec{v}') v_x' f_{eo}(\vec{v}') dv'$ where $w(\vec{v}, \vec{v}')$ is the probability for a comoving electron having the velocity $\vec{v}'$ to acquire after reflection from the target the velocity $\vec{v}$ with $v_x > 0$, corresponding to the motion from the target. The function $w(\vec{v}, \vec{v}')$ is connected with the coefficient η by the relation $\eta = \int_{v_x > 0} w(\vec{v}, \vec{v}') d\vec{v}$. In the stationary state the flux

$v_x f(0, \vec{v})$ must be an odd function of the component v_x of the electron velocity along the x-axis. The solution of the set (1), (2) with these boundary conditions obtained with a help of the Laplace transformation leads to the following formulas representing the electric field E arising as a result of the electron back-scattering and the density of the back-scattered electrons $n(x) = \int f d\vec{v}$ as function of the coordinate x :

$$eE = \eta \chi W_e e^{-\chi x}, \quad n = \eta n_b e^{-\chi x}, \quad (3)$$

where $\chi = 1/r_d = (4\pi n_b e^2 / W_e)^{1/2}$

For $x = 0$ we get from (3) $n_0 = \eta n_b$ in accordance with elementary derivation described above. In the foregoing considerations we have not taken into account the phenomenon of secondary electron emission from the pellet surface induced both by the beam ions and by comoving electrons. According e.g. to [5] an ion having an energy of the order of MeV can eject a few electron η_{si} while striking a metal surface. The same is true for an electron having an energy of the order of 1 keV which ejects η_{se} secondary electrons. Taking into account these secondary electron emission processes we can obtain the density n_0 of the back-scattered electrons at the pellet surface from the condition of stationarity which must be now formulated as follows $(1-\eta)(n_b+n_0)v_b = (1+\eta_{se}+\eta_{si})n_b v_b$. This gives a generalised formula for the density of electrons at the pellet surface

$$n_0 = \alpha n, \quad \alpha = (1 + \eta_{se} + \eta_{si}) / (1 - \eta) - 1 \quad (4)$$

Assuming that the electron density as a function of coordinate x obeys (3), we get for the total number of electrons N per cm^2 of the target surface $N = \alpha n_b r_d$. In the stationary state the total positive charge accumulated inside metal shell of the pellet must be equal to total negative charge of electrons outside of the pellet surface, i.e. $q = eN$. Thus, the field E_0 arising at the pellet surface as a result of back-scattering and of the emission of the secondary electrons is equal to

$$E_0 = 4\pi q = 4\pi e \alpha n_b r_d = \alpha (4\pi m_e P / m_b v_b)^{1/2} \quad (5)$$

where $P = W_b n_b v_b$ is the power density transported by the beam ions and α is defined by (4). Assuming for a proton beam and Pb target $\eta_{si} = \eta_{se} = 1$ [5] and $\eta = 0,75$ [4] we get $\alpha \approx 10$. Assuming $P = 10^{14} \div 10^{15}$ Watt/cm² (the condition of breakeven) and $W_b = 5$ MeV we get $E_O = (1,4 \cdot 10^8 \div 4,2 \cdot 10^8)$ V/cm.

Such a strong fields can provoke different instabilities most important of which being, probably, the capillary wave instability of the pellet surface [6]. According to [7] the presence of the noncompensated electron layer at the target surface (a fluid metal or a dense plasma with a sufficiently sharp boundary) increases the growth rate of this instability which is equal to

$$\gamma = E_O \left(\frac{K}{r_d} \right)^{1/2} / (4\pi\rho)^{1/2} \quad (6)$$

where ρ is the mass density of the target surface, $K = 2\pi/\lambda$ and λ is the wave-length of the capillary wave. Assuming $\lambda = d = 0,1$ mm (d is thickness of the lead tamper shell) and $\alpha = 10$ we get from (6) $\gamma = (10^8 \div 3,5 \cdot 10^8)$ sec⁻¹ for $P = (10^{14} \div 10^{15})$ W/cm². This means that the tamper shell will be disrupted within a few nanoseconds and, hence, that the process of thermonuclear burning will become impossible. Thus, one can conclude that serious complications may arise as result of processes considered here in case light ions will be used as drivers in the ion-driven ICF concept.

REFERENCES

- [1] Duderstadt J., Moses G., Inertial Confinement Fusion, Wiley & Sons, 1982
- [2] Sayasov Yu.S., Helv. Phys. Acta, 57, 524, 1984
- [3] Sayasov Yu.S., Long K., Atomic Physics for Fusion, Proc. Second. Int. Workshop, Rutherford Lab. p. 563, 1986
- [4] Everhart T, J. Appl. Phys 31, 1483, 1960
- [5] Little P., in Handbuch der Physik, v. 21, p. 574, 1956
- [6] Landau L., Lifshits E., Electrodynamics of the Continuous Media, §5, Pergamon, 1960
- [7] Vladimirov V., Golovinskii P., Soviet Physics-JETP, 55, 884, 1982

CO₂-LASER KLEINWINKEL STREUEXPERIMENT ZUR UNTERSUCHUNG VON ELEKTRONENDICHTEFLUKTUATIONEN IN PLASMEN *

R. Philipona, O. Küttel und B.G. Vaucher

Physikinstitut, Universität Freiburg, CH-1700 Freiburg/Schweiz

Abstract: Elektronendichtefluktuations in Plasmen können durch kohärente Thomsonstreuung diagnostiziert werden. Eine vereinfachte Kleinwinkel Streumethode mit homodyner Signalüberlagerung wurde zu diesem Zweck entwickelt. Als Lokaloszillator für die homodyne Ueberlagerung dient die nullte Ordnung des Beugungsbildes eines dünnen Wolframdrahtes. Der Draht befindet sich im Hauptstrahl hinter dem Streuzentrum und wirft das Beugungssignal zur Ueberlagerung mit dem Streusignal in die Streuebene. Für die Justierung des Streuwinkels und der Streurichtung genügt ein einziger Drehspegel. Rayleighstreuung an Ultraschallwellen wurde zur Kontrolle der Streuanordnung angewendet. Erste Thomsonstreuresultate am Plasma liegen vor.

1. Einleitung

Zur Untersuchung von Plasmawellen und Mikroturbulenzen wurde ein Streuexperiment mit einem CO₂-Laser aufgebaut. Das Infrarot-Laserlicht tritt nur äusserst schwach in Wechselwirkung mit dem Plasma und stört daher das zu untersuchende Medium nicht. Bei der Kollektiv-Kleinwinkelstreuung [1,2] handelt es sich um eine Thomsonstreuung, in der die Lichtquanten vorwiegend an den Elektronen gestreut werden. Die Streumethode betrachtet das kollektive Verhalten der Elektronen und gibt so Aufschluss über Elektronendichteschwankungen und Turbulenzen. Die zusammenhängenden Elektronenoszillationen vermögen Licht in einem bestimmten Winkel θ zu streuen. Der Streuwinkel kann wie bei der Röntgenbeugung mit der Braggschen Reflexionsbeziehung berechnet werden.

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

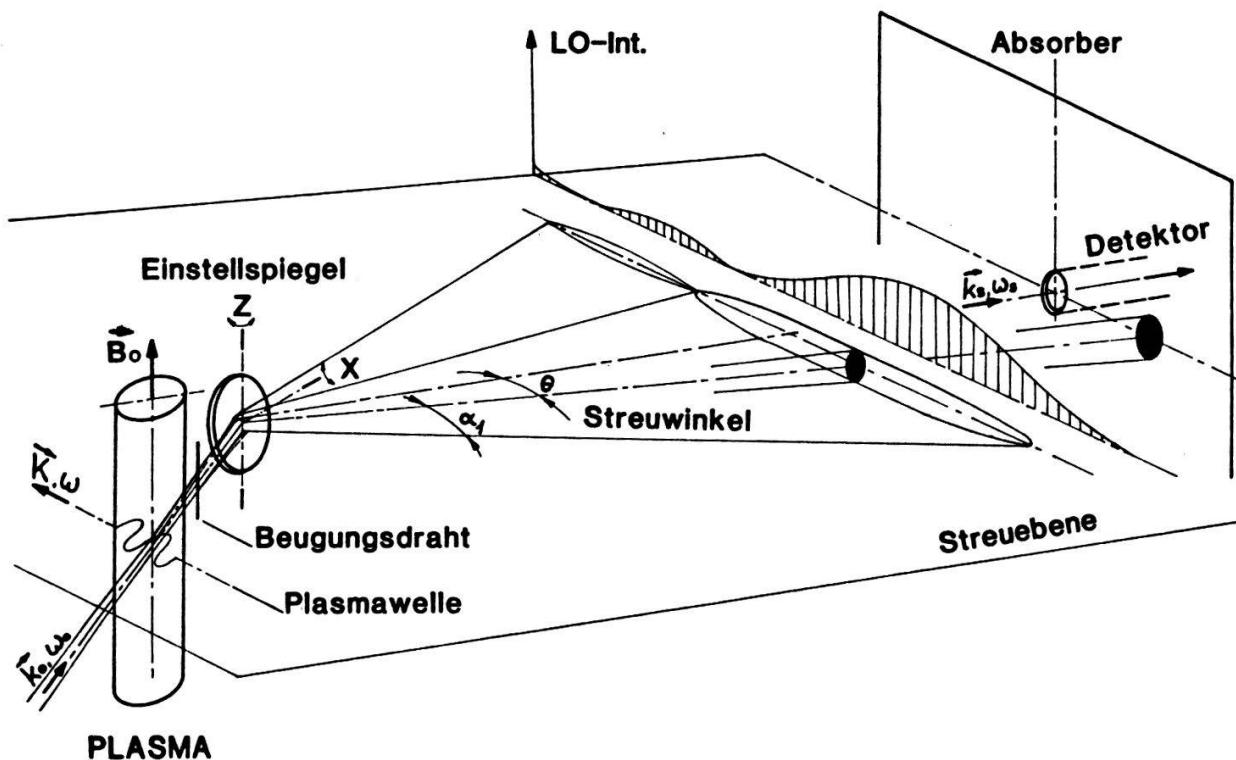
Die Wellenlänge Λ solcher Plasmawellen ist grösser als die Debyelänge λ_{De} , was bei einer Laserwellenlänge von $\lambda_0 = 10,6\mu$ zu sehr kleinen Streuwinkeln führt. Nach homodyner Ueberlagerung mit einem Lokaloszillator wird

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

das schwache Streusignal auf einem HgCdTe-Detektor empfangen. Die Messung des Streuwinkels θ und die Analyse des Frequenzspektrums ergibt Aufschluss über Wellenzahl, Frequenz und Amplitude der Plasmawelle.

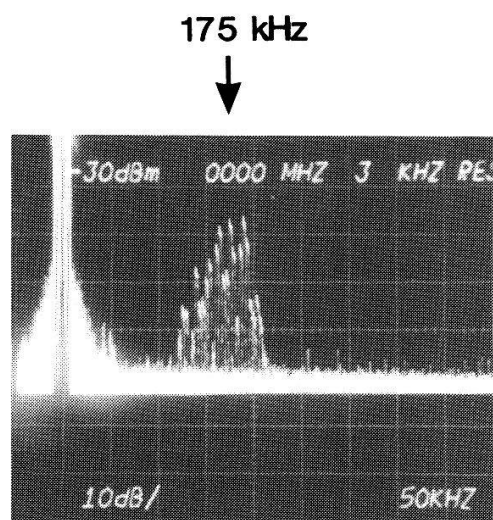
2. Streuanordnung

Der Laserstrahl fällt mit der Leistung von 30W durch die Plasmasäule und wird nach einem Strahlengang von 6m auf dem Absorber aufgefangen. Eine Plasmawelle, die sich quer zum Laserstrahl bewegt streut ein Signal nach der Braggbeziehung im Streuwinkel θ zum Detektor. Ein dünner Wolfrandraht, welcher hinter dem Plasma senkrecht im Laserstrahl steht, projiziert ein Beugungsbild in die Streuebene. Die nullte Ordnung dieses Beugungsbildes dient als Lokaloszillator. Mit dem Einstellspiegel kann durch Drehen um die Z-Achse der Hauptstrahl und das Beugungsbild in der Streuebene bewegt und so verschiedene Streuwinkel eingestellt werden. Zur Beobachtung von Wellen, die sich in der Richtung des Magnetfeldes $\vec{B}_0$ bewegen, kann der Beugungsdraht um 90° gedreht werden. Die Einstellung verschiedener Streuwinkel erfolgt nun über die X-Achse des Einstellspiegels. Die aus unseren Plasmabedingungen möglichen Streuwinkel betragen $\theta < 2^\circ$. Bei einem Drahtdurchmesser von $D = 0.1 \text{ mm}$ beträgt das erste Beugungsminimum $\alpha_1 = 6^\circ$. Die LO-Intensität bleibt so für die betrachteten Streuwinkel praktisch konstant.

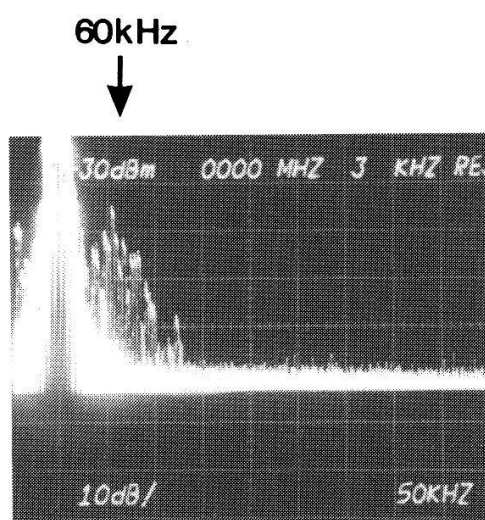


3. Kontrolle und Eichung der Streuanordnung

Durch Rayleighstreuung wird Licht auch von Ultraschallwellen gestreut. An Stelle des Plasmas bringen wir einen Hochtonlautsprecher an, welcher im Ultraschallbereich ähnlich dem Plasma ebene Wellenfronten quer zum Laserstrahl aussendet. Die beiden Aufnahmen zeigen Frequenzspektren welche bei zwei verschiedenen Streuwinkeln aufgenommen wurden. Während der Aufnahme sendet der Ultraschallgeber eine konstante Welle aus, deren Frequenz von 0 - 300 kHz hinaufgefahren wird. Die linke Aufnahme, welche bei einem Streuwinkel $\theta = 5,3$ mrad gemacht wurde, zeigt ein maximales Streusignal bei ~ 175 kHz. Für diese Frequenz und die dem Streuwinkel entsprechende Wellenlänge $\Lambda = 0,2$ cm ergibt die Dispersionsbeziehung eine Schallgeschwindigkeit von $C_s = 350$ m/s. Die bei kleinerem Streuwinkel $\theta = 1,8$ mrad aufgenommene rechte Aufnahme bestätigt ebenfalls die Dispersionsbeziehung. Die Ultraschallwelle kann so als Kontrolle oder bei bekannter Schallgeschwindigkeit als Eichung der Streuanordnung dienen.



$\theta = 5.3$ mrad

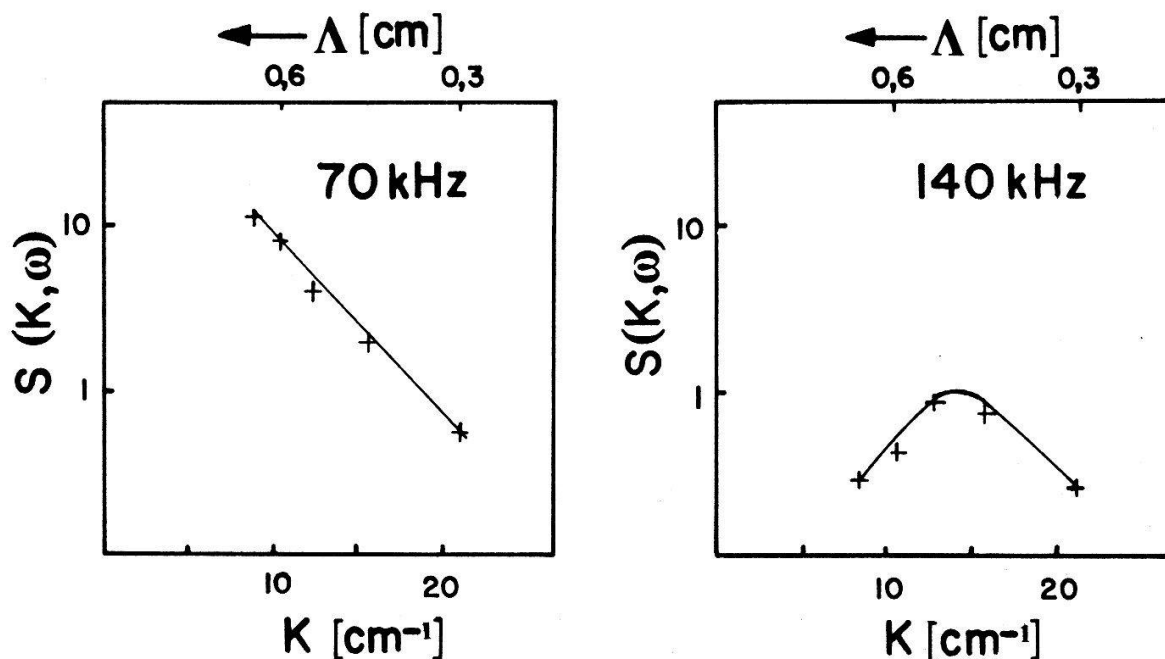


$\theta = 1.8$ mrad

4. Streusignale vom Plasma

Erste Streusignale konnten an einem He-Plasma gemessen werden. Es handelt sich um ein magnetisiertes Plasma welches mit Mikrowellen gezündet wird. Bei einem Neutralgasdruck von 5 mTorr und einem axialen Magnetfeld von 2,3 kG hat die Plasmasäule einen Radius von 4 cm. Die mittleren Werte der Elektronen-Dichte und -Temperatur betragen $\bar{n}_e = 4 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ respektive $\bar{T}_e = 4 \text{ eV}$.

Während ersten Messungen wurde der Wellenvektor $\vec{K}$, senkrecht zum Magnetfeld $\vec{B}_0$, von Turbulenzen im Frequenzbereich unter 1 MHz gemessen. Frequenzspektren wurden für verschiedene Streuwinkel und deren entsprechenden Wellenzahlen aufgenommen und analysiert. Die untenstehenden Figuren zeigen die Streuleistung in Funktion der Wellenzahl bei einer festen Frequenz. Auf der rechten Figur ist bei einer Frequenz von 140 kHz ein Maximum der Streuleistung bei einer Wellenzahl von $|\vec{K}| = 14 \text{ cm}^{-1}$ erkennbar. Bei 70 kHz erlaubt der bisher minimal eingestellte Streuwinkel von $\theta = 1,5 \text{ mrad}$ keine eindeutige Zuordnung einer Wellenzahl.



5. Schlussfolgerungen

Ein vereinfachtes Kleinwinkel Streuexperiment, bei dem Streuwinkel und Streurichtung mit einem einzigen Spiegel eingestellt werden, wurde aufgebaut und mittels Ultraschall geeicht. Mit dieser Streuanordnung können kurzwellige Dichtefluktuationen im Wellenlängenbereich von $0,03 \text{ cm} < \Lambda < 0,8 \text{ cm}$ untersucht werden.

- Referenzen: [1] R.E. Slusher and C.M. Surko, Phys. Fluids 23, 472 (1981)
 [2] R. Philipona, Helv. Phys. 58, 910 (1985)

Monostatischer faseroptischer Heterodyneempfänger

R. Bättig, R. Stierlin, P.-D. Henchoz, H.P. Weber

Institut für angewandte Physik, Universität Bern, 3012 Bern

Es wurde ein optischer Heterodyneempfänger entwickelt, bei dem Sende- und Empfängeroptik über eine polarisationserhaltende Monomodefaser mit der Mischeinheit verbunden sind. Wir arbeiten mit zueinander senkrecht polarisierten Signal- und Lokaloszillatorfeldern, was balanciertes Mischen mittels gekreuzten Analysatoren ermöglicht. Die erreichte Excess Noise Reduktion erlaubt Shot Noise limitierte Detektion. Die eingangsseitig minimal detektierbare optische Signalleistung beträgt, unter Einbeziehung von Verlusten und nicht optimaler Mischeffizienz, 10^{-18} WHz $^{-1}$. Mit dem Aufbau wurden (bei einer Beleuchtungsleistung von 550 μ W) Dopplermessungen auf Distanzen bis zu 13 m durchgeführt. Die maximale Reichweite dürfte zwischen 30 und 40 m liegen.

Erzeugung von 80 fsec Pulsen in einer Glasfaser durch parametrische Verstärkung und Solitoneffekt

P. Beaud, B. Zysset, W. Hodel, H.P. Weber

Institut für angewandte Physik, Universität Bern, 3012 Bern

In einem Glasfaserresonator werden durch Frequenzkonversion ultrakurze, solitonähnliche Pulse erzeugt. Als Pumpquelle dient ein Dye-Laser, der Pulse einer Dauer von 0.9 psec mit einer Spitzenleistung von 1.2 kW in einem Wellenlängenbereich 1.25 - 1.35 μ m emittiert. Zwei nichtlineare Effekte (i) Vierwellenmischen und (ii) stimulierte Ramanabsorption sind für die effiziente Energiekonversion von der Pump- in die Stokesfrequenz verantwortlich. Pulse einer Dauer von 80 fsec mit einer Spitzenleistung von 500 W bei Wellenlängen von 1.37 - 1.4 μ m wurden generiert. Im Einzeldurchgang erhält man Pulse einer Dauer von 150 - 240 fsec bei Wellenlänge von 1.37 bis 1.47 μ m.

Laser Schneiden in Gels als Test für Laser Chirurgie

A.D. Zweig, V. Romano, H.P. Weber

Institut für angewandte Physik, Universität Bern, 3012 Bern

Mit einem gepulsten Laserstrahl geeigneter Wellenlänge, fokussiert auf die Oberfläche eines Gels, kann dieser zu Verdampfen gebracht werden. Es entsteht ein Loch von Sub-mm Durchmesser und mm Tiefe. Die Verdampfung, die auf heftigem Sieden basiert, das sich in einem Zeitraum von 500 μ s abspielt, wurde mit einer Filmkamera festgehalten. Durch Messen der Bohrgeschwindigkeit wurden die thermodynamischen Zustandsgrößen während des Bohrvorganges bestimmt. Bei Leistungsdichten von bis 10^6 W/cm² finden wir mit 10,6 μ m Strahlung Bohrgeschwindigkeiten im Bereich von m/s. Dabei entstehen Temperaturen von 200-350°C, die zugehörigen Drucke sind 10-100 bar.

Reduktion von Intensitäts Noise in einem fiberoptischen balancierten Heterodyndetektions-System

R. Stierlin, R. Bättig, P.-D. Henchoz, H.P. Weber

Institut für angewandte Physik, Universität Bern, 3012 Bern

Für unser Heterodynexperiment untersuchten wir zwei Mach-Zehnder Interferometer, beide mit single mode polarisationserhaltenden Fibern. Eines mit Beamsplitter, das andere mit einem fiberoptischen direktionalen Koppler als Mischelement.

Bei Verwendung eines He-Ne Lasers, der gleichzeitig auf mehreren longitudinalen Moden emittierte, waren Intensitätsschwankungen des Laserlichtes die dominierende Noise-Quelle bis 100 kHz. Mit einer balancierten Detektion konnte dieser Excess Noise drastisch reduziert werden.

Es war möglich, die durch den Shot Noise gegebene Detektionslimite zu erreichen.

Photovoltaik II

DC et HF DEPOSITION DES COUCHES EN a-Si:H.

P. KOCIAN, EPFL, IPA 1015 LAUSANNE

Les films en a-Si:H déposés dans les plasmas de décharge dans le silane (SiH_4) sont les produits des réactions plasmachimiques dans ce gaz. Le débit d'une réaction plasmachimique dépend entre autre de l'énergie des électrons et de sa distribution. Le travail présenté étudie ces paramètres dans les décharges à courant continu et à hautes fréquences et trouve certaines particularités pour ces deux types de plasma. A la base des résultats obtenus on fait des conclusions sur les processus de déposition des films en a-Si:H dans les plasma DC et HF.

Elektrochemische Abscheidung von amorphem Silizium aus nichtwässrigen Lösungsmitteln bei Raumtemperatur

J. Gobet und H. Tannenberger

CSEM, Rue A.-L. Breguet 2, 2000 Neuchâtel

Dünne Schichten aus amorphem Silizium wurden bei Raumtemperatur aus nichtwässrigen Lösungen von Halogensilanen elektrochemisch abgeschieden. Eine typische Lösung bestand aus Trichlorosilan und Tetrabutylammoniumbromid oder -perchlorat als Leitsalz in Tetrahydrofuran. Die Morphologie der Schichten hängt nur wenig von der SiHCl_3 Konzentration (0,05 - 1,0 M), der Abscheidegeschwindigkeit (0,5 - 2 $\mu\text{m/h}$) und der Natur des Substrats (Pt, Au, Cu, Ni, ITO auf Glas) ab. Schichten, dünner als 2500 Å, sind glatt und ohne im Rasterelektronenmikroskop sichtbare Fehler. Dickere Schichten haben Risse. Augeranalyse zeigte ~ 8 at % Sauerstoff, ~ 4 at % Kohlenstoff und 1,5 at % Chlor als Verunreinigungen.

Amorphous silicon Schottky-diodes produced by a high rate silane glow-discharge decomposition method.M.Brechet, K.Prasad, N.Wyrsch, H.Curtins and A.V.Shah

Institut de Microtechnique, Universite de Neuchatel, 2000 NEUCHATEL

Amorphous silicon Schottky-diodes of the type Au/a-Si:H have been fabricated from films prepared with growth rates as high as 20 Å/sec. Device parameters obtained from Current-Voltage and Spectral-Response measurements will be presented and correlated with various preparation parameters of the films. It is shown that Schottky-diodes are useful devices to determine the mobility-lifetime products of holes for the intrinsic amorphous material.

Optik, Spektroskopie

Diffractive Diffusers for Display Applications

M.T. Gale and K. Knop

Laboratories RCA Ltd., Badenerstr. 569, 8048 Zurich

The structure and design of diffractive optical diffusers for display applications is discussed and a new technique for designing complex relief structures with new, improved diffuser behaviour is described. Such diffusers can be fabricated by laser beam writing techniques. A specific example is given of a diffractive diffuser for improving the subjective quality of color CRT data displays by acting as a low-pass spatial-frequency filter to reduce the noise generated by the matrix dot structure.

Optisch nichtlineare Eigenschaften von Iodoformkomplexen

M. Ruggiero, J. Fünfschilling, M. Stähelin

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

Organische Kristalle können deutlich grössere optische Nichtlinearitäten zeigen als die gängigen anorganischen Materialien. Die von uns untersuchten Komplexe von Iodoform mit anderen Molekülen wie Schwefel, Urotropin oder Chinolin zeigen ein bis 20-mal grösseres Signal bei Frequenzverdopplung als der häufig als Standard benutzte Harnstoff. Wir regen unsere Proben mit einem durchstimmbaren Farbstofflaser an und untersuchen die Effizienz für Frequenzverdopplung.

Unsere Messungen haben wir sowohl an Pulvern wie auch an Einkristallen gemacht.

Fiberoptischer Distanzsensor mit Autofokus

S. Wüthrich, B. Zysset, H.P. Weber

Institut für angewandte Physik, Universität Bern, 3012 Bern

Es wird ein Distanzsensor mit Autofokussierung vorgestellt. Sein Arbeitsabstand a liegt im Bereich von etwa 2 bis 100 mm, wobei die erreichte Fokussierpräzision z besser als ein Prozent der verwendeten Brennweite ist. Bei einer Wellenlänge von 633 nm und $a = 18$ mm wurden z.B. $z = \pm 2,5 \mu\text{m}$ erreicht, was für $f = 4,5$ einer Durchmesserergrösserung des Brennflecks von nur 1,3 % entspricht. Im Gegensatz zu andern Methoden, welche eine Phasenverschiebung, beziehungsweise eine Pulslaufzeit messen, verwendet dieser Sensor einen normalen cw-Laser. Da das Licht über Fibern zu- und weggeführt wird, ist eine Trennung von Sensor und Detektionsteil möglich, was zusammen mit der Integrierbarkeit des Sensors vielseitige Einsatzmöglichkeiten verspricht.

Halbleiter, dünne Schichten, Mikroelektronik I

Si HETEROEPITAXY : RBS AND XPS INVESTIGATION OF NiSi_2 ON Si(111)

M. Ospelt, J. Henz, H. von Känel, P. Wachter, Laboratorium für Festkörperphysik ETH-Hönggerberg, CH-8093 ZÜRICH, Switzerland

Epitaxial silicide films on silicon constitute a model system for the study of the Schottky barrier at the semiconductor/metal interface. Silicides in general moreover find wide application in device fabrication. NiSi_2 is one of the silicides best suited for epitaxial growth due to its small lattice mismatch ($\sim 0.4\%$).

NiSi_2 growth on n-doped ($0.5\text{--}1.5\ \Omega\text{cm}$) Si(111) 3'' substrates was performed using the so-called template technique established by Tung et al. (1), i.e. deposition of Ni at room temperature and subsequent annealing above $300\ ^\circ\text{C}$. This procedure allows to grow epitaxial NiSi_2 films on Si(111) of either type A or type B orientation, depending on the amount of Ni initially deposited. We usually deposited $18\ \text{\AA}$ of Ni to form a $\sim 60\ \text{\AA}$ thick NiSi_2 layer of type A orientation, whereas $4\ \text{\AA}$ of Ni lead to a $\sim 14\ \text{\AA}$ thick NiSi_2 type B layer. By evaporation of additional thin layers of Ni at room temperatures, followed by annealing, the template thickness can be extended up to $\sim 100\ \text{\AA}$.

Using XPS and SEM to monitor the silicide coverage, we were able to show that these templates desintegrate into islands at temperatures above $400\ ^\circ\text{C}$. The thermal instability of the templates rules out normal techniques to grow perfect thicker NiSi_2 films (2). Substrate temperatures usually used in MBE (coevaporation of Si and Ni at $550\text{--}750\ ^\circ\text{C}$) are too high. Increase of template thickness by further deposition of Ni and annealing below $400\ ^\circ\text{C}$ leads to 3-dimensional growth. As a result NiSi_2 films grown by these two methods exhibit rough surfaces.

For this reason a modified MBE technique was used to grow NiSi_2 layers with thicknesses up to $1100\ \text{\AA}$ onto templates of both orientations. Alternating deposition of typically $1\ \text{\AA}$ of Ni and $4\ \text{\AA}$ of Si at temperatures as low as $\sim 350\ ^\circ\text{C}$ resulted in epitaxial, entirely smooth and featureless (optical interference microscopy and SEM) NiSi_2 layers of excellent crystallinity.

The latter was investigated by Rutherford Backscattering Spectrometry (RBS) and channeling. A good measure of crystalline quality is the minimum

channeling yield $X_{\min}$. It corresponds to the yield obtained for a beam aligned along a major crystallographic axis, normalized to the random yield. The best reported values of $X_{\min}$ for epitaxial NiSi_2 layers on $\text{Si}(111)$ lie in the range of 3-4% (1,3) for films grown by deposition of Ni at temperatures above 650 °C.

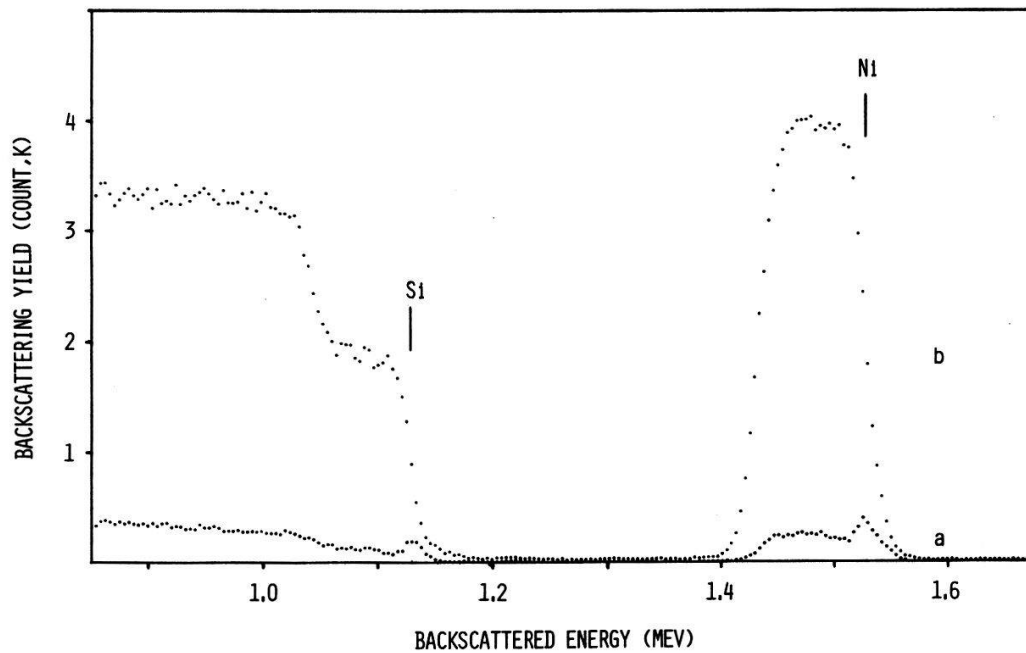


Fig. 1. (111) channeling (a) and random (b) RBS spectra of an $\sim 1100 \text{ \AA}$ thick NiSi_2 layer on $\text{Si}(111)$ grown by alternating evaporation of $1 \text{ \AA}$ of Ni and $4 \text{ \AA}$ of Si onto a $60 \text{ \AA}$ thick template. Substrate temperature 360 °C.

Fig. 1 shows the 2 MeV ^4He RBS and channeling spectra of an $\sim 1100 \text{ \AA}$ thick type A layer grown at a substrate temperature of 360 °C. This layer exhibits a minimum channeling yield $X_{\min} = 5\%$ in the (111)-direction.

Films exceeding a few hundred $\text{\AA}$ no longer break up into islands when heated to more than 500 °C, but their surface was found to deteriorate substantially during such a treatment. Due to this thermal instability and the poor growth of Si at temperatures below 450 °C, overgrowth by Si will meet serious obstacles.

In conclusion, we have been able to grow perfectly smooth epitaxial NiSi_2 layers of thicknesses up to $\sim 1100 \text{ \AA}$ on $\text{Si}(111)$ by a modified MBE technique using substrate temperatures as low as $\sim 360^\circ\text{C}$. They are of excellent crystallographic perfection comparable to the best layers grown at much higher temperatures. Thus, we could combine excellent surface morphology with crystallographic perfection.

Acknowledgement

We would like to express our special gratitude to Dr. R. E. Pixley, Physics Institute, University of Zürich, for the use of the Van de Graaf accelerator, to Dr. H. Zogg, ETH-Hönggerberg, Afif, Zürich, for many valuable discussions and to H.-J. Gübeli for his excellent technical support.

Financial support by the Swiss National Science Foundation (NFP 19) is also gratefully acknowledged.

References

- (1) R.T. Tung, J.M. Gibson and J.M Poate, Appl. Phys. Lett 42 (1983) 888.
- (2) H. von Känel, T. Graf, J. Henz, M. Ospelt and P. Wachter
(to be published in J. Crystal Growth).
- (3) K.C.R. Chiu, J.M. Poate, L.C. Feldmann and C.J. Doherty, Appl. Phys. Lett 36 (1980) 544.

SPANNUNGSRELAXATION IN EPITAKTISCHEM $(\text{Ba,Ca})\text{F}_2$ AUF Si

H. Zogg, ETH Höggerberg, AFIF, 8093 Zürich

Zusammenfassung: Die mechanischen Spannungen von mittels Molekularstrahl-epitaxie (MBE) auf Si(111) aufgewachsenen CaF_2 - BaF_2 Schichtfolgen wurden mit Röntgendiffraktion gemessen. Trotz grosser Gitterfehlpassung (bis 14%) und stark verschiedenen thermischen Ausdehnungskoeffizienten sind die Spannungen bei Raumtemperatur vollständig relaxiert, sofern die Schichtdicke oberhalb etwa 2500 Å liegt. Die Relaxation geschieht auf athermische Weise selbst bei Temperaturänderungen nahe Raumtemperatur. – Als epitaktische Pufferschicht verwendet, ermöglichten diese Fluoride das einkristalline Wachstum von $(\text{Pb,Sn})\text{Se}$ und CdTe auf Si. Ihre Fähigkeit zur Spannungsrelaxation in solchen heteroepitaktischen Halbleiterstapeln mit verschiedenen thermischen Ausdehnungen der Einzelschichten ist äusserst willkommen und lässt weitere Anwendungen auch mit anderen Halbleiterkombinationen erwarten.

Epitaktische CaF_2 - BaF_2 -Schichtfolgen wurden mittels Molekularstrahl-epitaxie (MBE) auf Si(111) Oberflächen abgeschieden. Die zuerst aufgewachsene dünne CaF_2 -Schicht (Gitterfehler ca. 2% gegenüber Si bei der Wachstumstemperatur von 700°C) ermöglicht die Abscheidung von unverzwilligtem BaF_2 mit etwa 14% grösserer Gitterkonstante. Die Wachstumsprozedur sowie strukturelle Eigenschaften dieser Schichten wurden anderswo beschrieben [1-4]. Die thermischen Ausdehnungskoeffizienten der Fluoride sind wesentlich höher (ca. $2 \cdot 10^{-5}/\text{K}$ bei Raumtemperatur) als die von Si ($2.6 \cdot 10^{-6}/\text{K}$). Wird angenommen, dass während des Schichtwachstums oberhalb der kritischen Schichtdicke (< 10 Å) wegen der Gitterfehlpassung zwar viele Grenzflächenversetzungen entstehen, die Struktur nach dem Wachstum jedoch nur elastisch und nicht plastisch verformt, so würden allein aus der Differenz der thermischen Ausdehnungen zusätzliche Dehnungen parallel zur Oberfläche von ca. 0.7% entstehen.

Die Dehnungen in der BaF_2 -Schicht wurden mit Röntgendiffraktion gemessen. Mit der verwendeten Bragg-Brentano Geometrie mit symmetrischem Einfallswinkel- und Ausfallswinkel sind die (hhh)-Reflexe zugänglich. Aus diesen kann die "Gitterkonstante" senkrecht zur Oberfläche, und durch Vergleich mit der Gleichgewichtsgitterkonstanten die Dehnung senkrecht zur Oberfläche $e_{\perp}$

erhalten werden. Die eigentlich interessierende Dehnung $e_{\parallel}$ parallel zur Oberfläche folgt aus der Elastizitätstheorie. Sie ist für BaF_2 um etwa 15% von $e_{\perp}$ verschieden [5].

Fig. 1 zeigt die gefundenen Dehnungen $e_{\perp}$ als Funktion der Dicke d der BaF_2 -Schicht. Für Schichtdicken oberhalb ca. 2500 Å ist $e_{\perp}$ und damit die mechanische Spannung innerhalb der Messgenauigkeit vollständig relaxiert. Bei dünneren Schichten wird eine geringe Zugspannung beobachtet, die jedoch höchstens für die dünnsten gemessenen Schichten mittels der thermischen Ausdehnungsdifferenz erklärt werden kann. Dies bedeutet, dass nach dem Schichtwachstum und beim Abkühlen von der Wachstumstemperatur (ca. 400°C für die BaF_2 Schicht) eine Spannungsrelaxation durch plastische Verformung auftritt. Diese geschieht auf nicht thermisch aktivierte Weise, da auch bei schnellen Temperaturzyklen nahe Raumtemperatur sofortige Relaxation ohne Hystereseeffekte beobachtet wurde [5]. Die Spannung wird wahrscheinlich durch Bildung und Bewegung von Grenzflächenversetzungen abgebaut. Gleiten von Versetzungen im Innern der BaF_2 Schicht scheint auf Grund der CaF_2 -Struktur der Gruppe IIa-Fluoride bei diesen Temperaturen weniger wahrscheinlich zu sein.

Nahezu identische Dehnungen in Funktion der Schichtdicke wurden von einer anderen Gruppe mittels Ionen-Channeling bei Raumtemperatur auch in epitaktischem CaF_2 auf $\text{Si}(111)$ beobachtet [6,7].

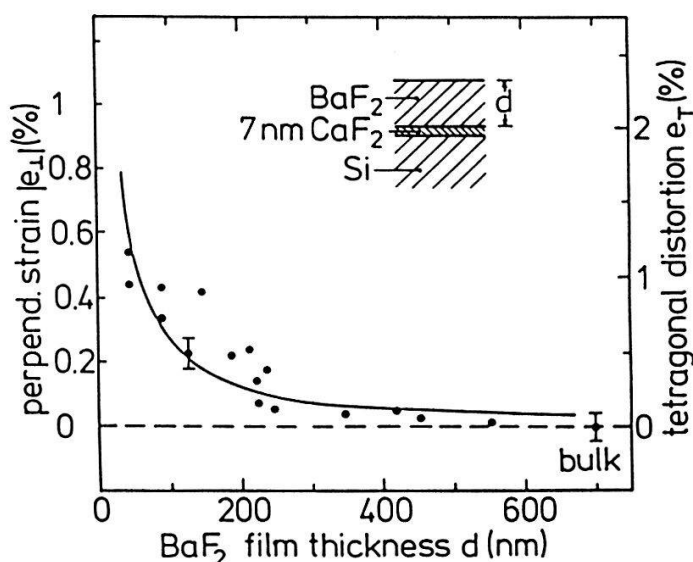


Fig. 1. Mit Röntgendiffraktion gemessene Dehnungen $e_{\perp}$ senkrecht zur Oberfläche von epitaktischem BaF_2 auf $\text{CaF}_2/\text{Si}(111)$ als Funktion der BaF_2 Schichtdicke (Punkte, Ref.5), sowie berechnete Kurve.

Im thermodynamischen Gleichgewicht ergibt sich die Dehnung e als Funktion der Schichtdicke d aus der Minimalisierung der Verzerrungsenergie (die durch die Dehnung der Schicht zum Auffangen einer veränderten Fehlpassung, z.B. verursacht durch Temperaturänderungen, resultiert) und der Energie einer Anordnung von Fehlpassungsversetzungen in der Grenzfläche. Aus der Theorie von Van der Merwe, Matthews und anderen [8] folgt

$$e = D \cdot \ln(R/b)/d. \quad (1)$$

Die Konstante D ist durch die Materialparameter von Schicht und Substrat gegeben. Wird angenommen, dass ein quadratisches Netz von Stufenversetzungen mit Burgersvektor b in der Grenzfläche gebildet wird, gilt

$$D = G_s b / [4\pi(G_o + G_s)(1 + \nu)] \quad (2)$$

mit G_s , G_o Schubmodul im Substrat und in der Schicht und ν Poisson'sche Zahl. Der logarithmische Faktor in Gl. (1) ist durch das langreichweitige Spannungsfeld einer Versetzung bedingt. Die aus der Kontinuumstheorie berechnete Verzerrungsenergie würde divergieren, sodass das Spannungsfeld an geeigneten Stellen abgeschnitten werden muss. Zum Kern der Versetzung hin wird dazu üblicherweise ein Abstand b , entsprechend dem Burgersvektor, verwendet. Die äussere Grenze R wird entweder durch die Schichtdicke $R=d$ gegeben, sofern der Abstand S zwischen den einzelnen Versetzungen grösser als d ist; andernfalls wird $R=1/2 \cdot S=1/2 \cdot b/(f-e)$ gesetzt, d.h. ein Radius gewählt, der aus dem nötigen Abstand zwischen den einzelnen Versetzungen zum Auffangen der Fehlpassung f folgt. Die Dehnung in der Schicht ist damit im ersten Fall gar nicht ($R=d$) oder im zweiten Fall nur schwach [durch $\ln(f-e) \cdot 2$] von der Fehlpassung abhängig.

Die in der Figur nach Gl. (1) eingezeichnete Hyperbel mit dem Vorfaktor als Anpassungsparameter gibt die experimentellen Daten befriedigend wieder. Allerdings ist dieser angepasste Vorfaktor etwa 5 mal grösser, als nach Gl. (2) aus den Materialparametern von BaF_2 und Si und einem Burgersvektor $b=a/2\langle 110 \rangle = 4.4 \text{ \AA}$ zu erwarten wäre. Eine solche Diskrepanz ist angesichts des stark vereinfachten Modelles, in das die Struktur der Grenzfläche und die absolute Fehlpassung nicht oder nur wenig eingehen, nicht erstaunlich. Für eine verfeinerte Berechnung, allenfalls mit Hilfe numerischer Methoden [9], müsste vorerst Art und Anordnung der Grenzflächenversetzungen sowie deren Bewegung genauer geklärt werden.

In Anwendungen als Zwischenschicht um Heteroepitaxie verschiedener Halbleiter mit stark verschiedenen Gitterkonstanten zu ermöglichen, ist die

Fähigkeit zur Spannungsrelaxation äusserst willkommen. In mittels Fluorid-Zwischenschichten auf Si aufgewachsenem epitaktischem CdTe [10,11] wurde tatsächlich gefunden, dass die mechanischen Spannungen im CdTe relaxiert sind [11]. Weiter dürfte selbst bei wohlbekannten Heteroepitaxie-Systemen wie GaAs auf Si eine spannungsrelaxierende Zwischenschicht Vorteile bringen, indem dickere Schichten gewachsen werden können und die Wafer keine Durchbiegung aufweisen.

Die Arbeit wurde von der Gruppe für Rüstungsdienste, Bern, sowie vom schweizerischen Nationalfonds finanziell unterstützt.

Referenzen:

- [1] H. Zogg, M. Hüppi, Appl. Phys. Lett. 47, 133, 1985.
- [2] H. Zogg, W. Vogt, H. Melchior, Proc. SPIE 587, 1986, p. 170.
- [3] H. Zogg, W. Vogt, H. Melchior, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 71, 1986.
- [4] H. Zogg, P. Maier, H. Melchior, J. Cryst. Growth. 1987, to be published.
- [5] H. Zogg, Appl. Phys. Lett. 49, XXX, Oct. 1986.
- [6] S. Hashimoto, J.-L. Peng, W.M. Gibson, L.J. Schowalter, R.W. Fathauer, Appl. Phys. Lett. 47, 1071, 1985.
- [7] L. J. Schowalter, R.W. Fathauer, F.A. Ponce, G. Anderson, S. Hashimoto, W.M. Gibson, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 69, 1986.
- [8] J.W. Matthews, in "dislocations in solids", F.R.N. Nabarro ed., North Holland 1979, p. 470.
- [9] B.W. Dodson, P.A. Taylor, Appl. Phys. Lett. 49, 642, 1986.
- [10] H. Zogg, S. Blunier, Appl. Phys. Lett., to be published.
- [11] H. Zogg, H. Melchior, Helv. Phys. Acta 59, 1021, 1986.

HIGH QUALITY GaAs and AlGaAs MATERIALS GROWN BY MBE

D. Martin, E. Tuncel, F. Morier-Genoud, J.L. Staehli, F.K. Reinhart, Institut de physique Appliquée, EPFL, 1015 Lausanne

1. Introduction

Optoelectronic devices which require high quality GaAs and AlGaAs materials can now be grown by using Molecular Beam Epitaxy (MBE). Control of the Al mole fraction x and the surface morphology of the layers is possible by optimizing growth parameters. We briefly describe the growth procedure and the characterization of the layers.

2. Growth of GaAs and AlGaAs

Layers are grown on Cr-O and Si doped substrates, which are cleaned by the procedure published by Cho(1). The growth chamber is equipped with two ion gauges, one of them mounted behind the substrate holder and can be rotated to face the effusion cells to monitor the beam equivalent pressures (BEP). Using the approximation made by Collins(2), the beam fluxes (J_{Al} , J_{Ga} , J_{As4}) can be calculated for each element. Assuming unity sticking coefficients for Ga and Al, the growth rates of GaAs and AlAs can be found.

The AlAs mole fraction x in AlGaAs is determined from room temperature photoluminescence measurements. To correlate x with growth parameters (BEP) we define x' :

$$x' = J_{Al} / (J_{Al} + J_{Ga}) \quad (I)$$

In fig.1 is a plot of x v.s. x' , which in principle should be equal. The differences between x and x' are attributed to errors in the pressure readings and possibly to Ga reevaporation at high substrate temperature (T_s), which is not included in (I).

A good reproducibility, to within 1%, is obtained when correlating x to x' .

During the growth T_s is monitored using an IR pyrometer, whose emissivity is calibrated by reading the ion gauge filament temperature (3). Correction for the glass viewport coating by Ga and As reevaporation is thus possible.

The layers grown were electrically characterized by Van Der Pauw and Schottky barrier measurements. High quality GaAs was grown with residual impurity concentrations as low as $|N_d - N_a| = 2.2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. Doping measurements on the AlGaAs layers will be presented elsewhere.

3. Morphology of AlGaAs

Surface and interface quality can be controlled by adjusting the substrate temperature and the relative As_4 flux ratio $DJ = J_{As_4} / (J_{Al} + J_{Ga})$. We characterized the morphology and material quality of the layers using a microscope and photoluminescence measurements. Our results are exposed in table 1 for layers grown on GaAs buffers at a rate of $0.8 / (1-x) \text{ um/hr}$, for $0.19 < x < 0.4$. We observed smooth surfaces and narrow PL peaks characteristic of good quality materials for conditions given in table 1. The same observations were made by Wicks et al., who noted that under these conditions there is a reduction of the incorporation of unwanted impurities (such as O) and the density of group III (Ga) vacancies, which both participate in non-radiative recombinations(4).

4. Photoluminescence

Photoluminescence (PL) measurements at room temperature and 5K were performed on various GaAs and AlGaAs epilayers. Low temperature and low excitation spectra ($< 10 \text{ W/cm}^2$) were obtained with a He-Ne laser (6328Å, 1.5 mW).

Transmission measurements were performed on one of the high purity, 3um thick, GaAs samples ($|N_d - N_a| = 8 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$) with a tungsten lamp after the chemical removal of the substrate.

The GaAs layer was protected by two AlGaAs buffers layers on both sides. Strain effects in the layer were observed that caused a splitting and shift of the $n=1,2$ free exciton states of the order of 0.9 meV and 1.2 meV. Considering stress distribution due to the layer geometry we estimate a residual stress of the order of 10^8 dyn/cm², which we attribute to the lattice mismatch of the layers (5). Stress effects can be relieved by the removal of the AlGaAs layers as shown by the absorption data of Fig. 2, where we can identify the $n=1,2$ states of the free exciton.

The same sample was also measured on a slightly different point of the surface. The Fig. 3 gives the result at this point. We identify the main and highest energy peak at 1.5161 eV as being the free exciton (FX), which is shifted from its expected energy by stresses in the layer. The lower energy peaks are attributed to neutral donor (D^0, X), ionized donor (D^+, X), bound excitons and excited states of (D^0, X). Acceptor bound excitons (1.5122-1.49 eV) are very weak, and defect induced transitions (1.511-1.504 eV) are absent. These data suggest n-type residual doping which was confirmed by thermoelectric measurements

5. Conclusion

We have shown that AlAs mole fraction can be controlled within 1% by using beam fluxes measurements. High quality GaAlAs layers with smooth surfaces can be obtained for $T_s > 695$ C and $J_{As4}/(J_{Al}+J_{Ga}) > 0.94$. Undoped GaAs is found to be n type with a residual free carriers concentration as low as $2.2 \cdot 10^{14}$ cm⁻³.

6. References

- (1) A.Y. Cho, Thin Sol. Films, 100, 291 (1983).
- (2) D.M. Collins, Varian CRM 346, May 15 (1979).
- (3) S.L. Wright, R.F. Marks, J. Vac. Sci. Tech. B4(2) (1986).
- (4) G. Wicks, W.I. Wang, C. Wood, J. Appl. Phys. 52, 5792 (1981).
- (5) G.A. Rozgonyi, P.M. Petroff, J. Crys. Gr. 27, 106 (1974).

Sample	T _s . °C	Al.mol.X	HMFV.meV	Texture	JAs4/JIII
110	550	.39	76	smooth	.84
92	550	.08	57	smooth	2.12
112	575	.39	74	smooth	1.68
105	630	.19	127	rough	1.39
126	660	.26	71	rough	1.31
121	668	.21	67	rough	1.58
125	678	.22	73	rough	1.77
117	695	.34	42	smooth	1.25
139	700	.25	43	smooth	1.34
138	710	.25	68	rough	.94

Table 1
Morphology
of GaAlAs

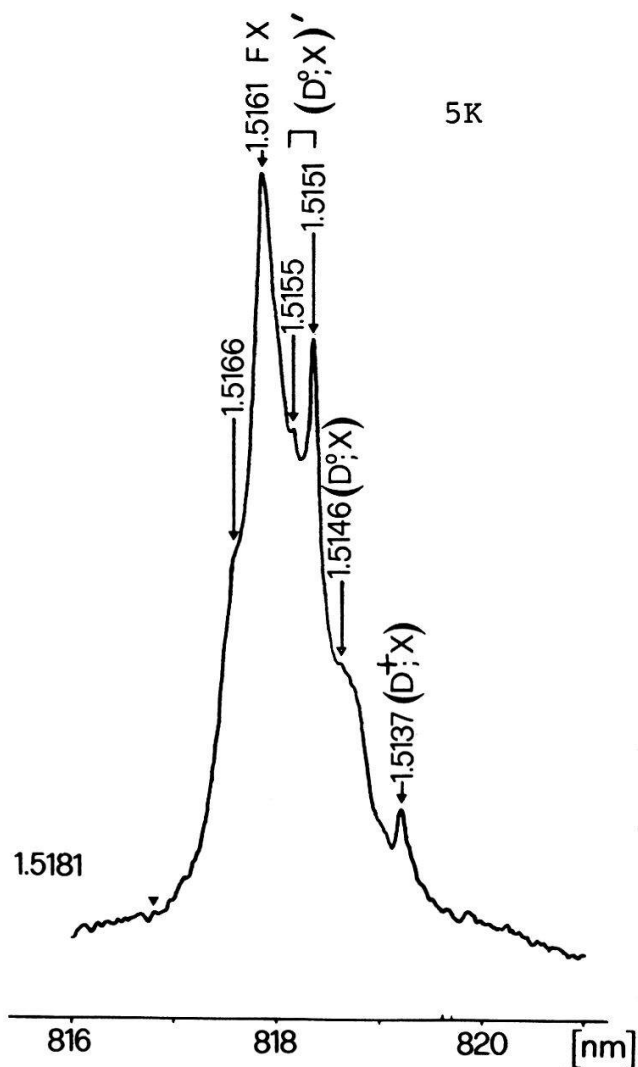


Figure 3

Low temp. PL of undoped GaAs

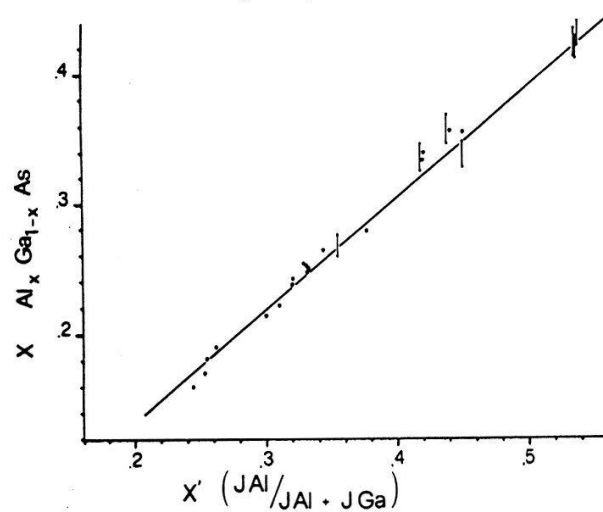


Figure 1

AlAs conc. x from room temp. PL
vs. AlAs x' calculated from beam
fluxes measurements.

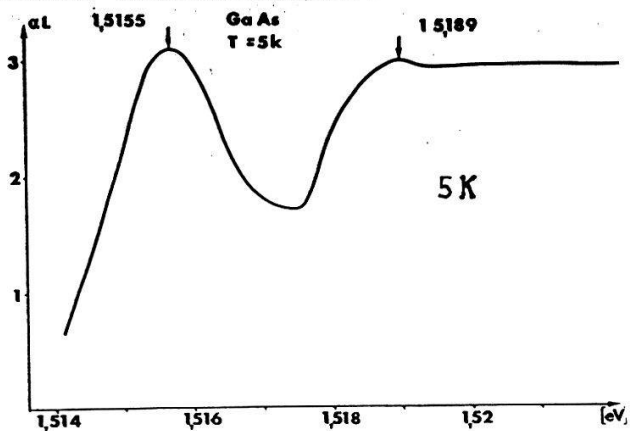


Figure 2

Absorption of undoped GaAs
calculated from transmission data

Elektrochemische Abscheidung von Silizium aus dem ternären System Silizium-tetrajodid, Aluminiumjodid, Lithiumjodid

H.R. Grüniger, R. Kern, D. Sutter

Technisch-Chemisches Laboratorium, ETH-Zentrum, 8092 Zürich

Obwohl Siliziumtetraiodid und Aluminiumjodid kovalente Verbindungen sind, die tief schmelzen, ist es dank der Lösungsvermittlung von Aluminiumjodid möglich, durch Komplexbildung Lithiumjodid in Siliziumtetraiodid-Aluminiumjodid-schmelzen zu lösen. ($\text{AlI}_3 + \text{LiI} \rightarrow \text{AlI}_4^- + \text{Li}^+$). Diese ternären Schmelzen sind Elektrolyte. Werden sie einer Elektrolyse unterworfen, wird Siliziumtetraiodid reduziert. Dabei wird primär nicht Silizium abgeschieden, sondern es entstehen Vorstufen, wie z.B. Si_2I_6 . Wird die Reduktion durch geeignete Uebergangsmetalljodide katalysiert, entsteht direkt Silizium.

OPTICAL PHASE MODULATION IN A TRANSFER DOPED $\text{GaAs-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ DOUBLE HETERO-STRUCTURE p-n JUNCTION.

J.Faist, F.K. Reinhart, D.Martin, E.Tuncel

Institut de physique appliquée, EPFL, 1015 Lausanne.

Double heterostructure $\text{GaAs-Al}_{0.29}\text{Ga}_{0.71}\text{As}$ p-i-n junction were fabricated by molecular beam epitaxy on (001)-oriented GaAs substrates. The active GaAs layer was nominally undoped and $0.38 \mu\text{m}$ thick. The orientation dependence of the optical phase modulation of the TE_0 and TM_0 modes was measured at two different wavelength ($\lambda_1 = 1.15 \mu\text{m}$ and $\lambda_2 = 1.89 \mu\text{m}$) with a Mach-Zehnder interferometer for the $[110]$ and $[1\bar{1}0]$ directions. No orientation dependence was formed for the TM_0 mode. The maximum phase shift observed was 0.64 Rad/mm for a TE_0 mode at λ_2 along the $[1\bar{1}0]$ direction. Capacitance data show a strong free carrier concentration of the GaAs waveguide layer due to transfer doping of the heavily doped $\text{Al}_{0.29}\text{Ga}_{0.71}\text{As}$ cladding layers ($p \sim 6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $n = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$). We describe a careful analysis of the voltage dependence of the phase modulation and show that the contributions are due to sizeable linear and quadratic electrooptic and plasma effects.

Sputter yields of some transition-metals and transition-metal compounds from sputtering experiments with ions in the keV range

A.J. Brunner, P. Oelhafen, and H.-J. Güntherodt

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

Thin films (50-200 nm) of Pd, Au, Pd_2Si , and IrSi prepared by evaporation on Si or quartz substrates have been removed by sputtering with Ar and in some cases with Ne ions with energies between 3-5 keV. Using the known thickness of the films and the total sputtering time approximate sputtering yields have been calculated. The results will be compared with published sputtering yields of elements for sputtering with Ar ions with energies between 0.5 - 1.0 keV (1). Effects of the sputtering such as ion beam mixing, preferential sputtering of one component, and ion implantation will be discussed.

(1) M.P. Seah: Thin Solid Films 81 (1981) 279

Depth Profiling of Tritium Sources

H. Stüssi and R.E. Pixley c/o Physics Institute, University
of Zürich

A knowledge of the tritium concentration as a function of depth for the sources used in the University Zürich's neutrino mass experiment is essential for the analysis of the β -spectrum. The sources, made by implanting 200 eV T_2^+ ions in an evaporated carbon layer, were analyzed by the nuclear recoil method. The energy loss spectrum of recoil tritons, produced by 400 keV ^{12}C ion bombardment, allowed a depth profile determination with a resolution of $\sim 50 \text{ \AA}$ FWHM. An E x B mass filter was used to separate recoil tritons from the more numerous elastically scattered ^{12}C ions.

Physikalische Strukturen, numerische Simulation

EXTREMALEIGENSCHAFTEN DENDRITISCHER STRUKTUREN

R. Georgii, A. Hübler^{*}, E. Lüscher, Physik-Dept., Technische Universität München, D-8046 Garching

Überblick: Es wird untersucht unter welchen Voraussetzungen die stationären Zustände von flexiblen Verankerungen mit jenen Zuständen übereinstimmen, bei denen die Dissipation extremal ist.

1. Einleitung

In letzter Zeit wurden einige aufregenden Eigenschaften von Dendriten in der Naturwissenschaft bekannt/1/. Sie treten meist in Zusammenhang mit Nichtgleichgewichtszuständen auf, die Grundstrukturen von Wurzeln und Ästen, Nervensträngen und Blutbahnen. In der Physik sind sie z.B. bei Kristallisationsvorgängen wichtig. Dendritische Einlagerungen (Kyrilithen) geben Porzellan eine besonders hohe Festigkeit. Da die meisten technischen Metalle dendritisch kristallisiert sind, ist die Verzahnung der Mikrodendriten entscheidend für deren elastischen Eigenschaften. Es ist daher zu vermuten, daß es sinnvolle Optimierungsvorschriften gibt, die durch dendritische Strukturen erfüllt werden. Im folgenden soll gezeigt werden, daß optimale Verankerungen eine dendritische Form haben.

2. Stationäre Systeme mit minimaler Dissipation

Zunächst betrachten wir folgendes Gedankenexperiment: Auf zwei schlecht leitenden Plattenelektroden E_1, E_2 liegt ein gut leitender Stab S der sich parallel zu den Platten bewegen kann. Eine geschwindigkeitsabhängige Reibungskraft wirkt der Verschiebung des Stabes entgegen. Die elektrischen Anschlüsse befinden sich am unteren Ende der Platten, die elektrischen

Zuführungen Z_1, Z_2 sind gute Leiter und verlaufen parallel zum Stab. Durch die

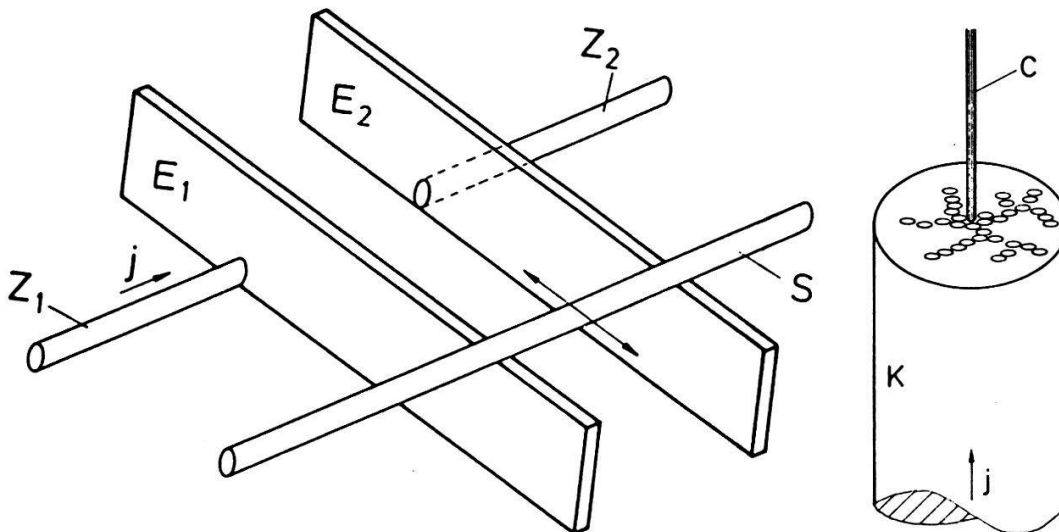


Abb. 1 siehe Text

Abb.2 siehe Text

Anordnung soll ein konstanter Strom fließen. Durch den relativ hohen Widerstand der Platten baut sich ein elektrisches Feld zwischen den Zuführungen Z_1, Z_2 und dem Stab auf, d.h. im System wird potentielle Energie gespeichert. Da diese potentielle Energie von der Position des Stabes abhängt, wirkt auf den Stab eine Kraft die ihn zu einer Gleitbewegung veranlaßt. Da der Bewegung des Stabes Reibungskräfte entgegenwirken, hat der Stab die Tendenz dem Zustand mit der geringsten potentiellen Energie entgegen. Aufgrund der Geometrie des Versuchsaufbaus wird genau dann auch der Ohm'sche Widerstand des Systems und damit auch die Dissipation minimal. Das System strebt somit dem Zustand mit der geringsten Dissipation entgegen. Dieser Gedankengang läßt sich folgendermaßen verallgemeinern: Bei einem gedämpften mechanischen System ist der Zustand mit der geringsten potentiellen Energie ein stabiler stationärer Zustand, wenn die potentielle Energie nicht explizit von der Zeit abhängt. Wenn bei einem stationären Zustand die Dissipation minimal (maximal) ist so besitzt das System einen Endzustand mit minimaler (maximaler) Entropieproduktion /2/.

3. Verankerungen mit minimaler Dissipation

In einem elektrisch schlecht leitenden langen (Kohle-)Stab K fließt ein zeitlich konstanter elektrischer Strom und wird an der Staboberseite von einer dünnen gutleitenden (Kupfer-)Elektrode aufgenommen (Abb. 2). Aufgrund der inhomogenen Stromverteilung im Kohlestab ist der Übergangswiderstand hoch. Nun werden auf der Staboberseite kleine Kupferplättchen ausgelegt, die nur einen Teil der Staboberseite bedecken. Die Plättchen können sich unter großen Reibungsverlusten bewegen. Die räumliche Verteilung der Plättchen ist genau dann zeitunabhängig wenn das Gesamtpotential $V = \int e(x)E(x) dx$ extremal ist, wobei $e(x)$ die Dielektrizitätskonstante und E die elektrische Feldstärke ist. Sind die Dichte der potentiellen Energie $e(x)*E(x)$ und die Dissipationsdichte $s(x)*E(x)$ (s = Leitfähigkeit) proportional zueinander so ist nach obigen Überlegungen die Gesamtdissipation direkt proportional zum Gesamtpotential. Beim vorgestellten Modell ist die Dissipation bei stabilen Endzuständen minimal. Die entstehende Form aus Kupferplättchen kann als elektrischer Verankerung mit minimalem Übergangswiderstand aufgefaßt werden. Aufgrund der mathematischen Analogien zwischen Wärmeleitung und elektrischer Leitung, lassen sich die Ergebnisse leicht auf thermische Anker übertragen. Bei der Wärmeleitung lautet das analoge Optimierungsproblem: Welche Form der thermisch gut leitende Anker (konstantes Volumen) besitzen, damit bei konstantem Wärmedurchfluß durch das System die mit dem Übergang(Abb. 2) verknüpfte Entropieproduktion minimal ist, d.h. i.a. die Temperaturdifferenz, gemessen in großem Abstand vom Übergang, zwischen den beiden Materialien am kleinsten ist. Diese Ergebnisse lassen sich auch auf andere Transportphänomene, wie die Ionenleitung, Kraftfluß und Informationsfluß übertragen.

4. Die Form optimaler Verankerungen

In der Simulation wurden mit einem Monte-Carlo-Algorithmus /3/ stationäre Verteilungen der Kupferplättchen ermittelt. Mit einem Relaxationsalgorithmus wurde die Feldverteilung auf der Oberseite des Kohlestabes ermittelt unter der Annahme, daß dort eine räumlich und zeitlich konstante Quellstärke herrscht und die elektrische Leitung nur in einer dünnen Schicht an der Oberseite des Kohlestabes stattfindet. Aus dem elektrischen Feld werden die Kräfte auf die Teilchen berechnet. Die Gesamtdissipation bei einer dendritischen Form verringert sich gegenüber dem Kreisförmigen Zustand

um ca. 30% wenn die Kupferplättchen 2% der Oberfläche ausfüllen.

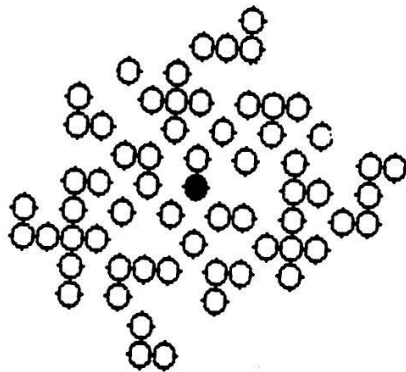


Abb. 3 zeigt, daß die entstehenden Strukturen eine dendritische Form besitzen.

Wir bedanken uns bei den Doktores O.Wohofsky, W. Kroy, H. Zinner und der Firma MBB für wertvolle Unterstützung.

/1/ B. Mandelbrot, The Fractal Geometry of Nature, Freeman (1983)

/2/ I. Prigogine, Vom Sein zum Werden, 4. Auflage, Piper, München(1985), S.98ff

/3/ K. Binder in Domb, Phase Transitions and Critical Phenomena, Ac. Press., Vol. 5b (1976)

* Teil der Promotionsarbeit

Strukturbildung von Metallteilchen in elektrischen und magnetischen Feldern

A. Schmöller, W. Kropf, A. Rosenberger, A. Hübler¹), E. Lüscher

Überblick: Metallteilchen, die elektrischen oder magnetischen Feldern ausgesetzt werden, bilden dendritische Strukturen aus. Computersimulationen, die auf physikalischen Theorien basieren, liefern vergleichbare Ergebnisse.

1. Metallteilchen im magnetischen Feld

1.1. Experiment

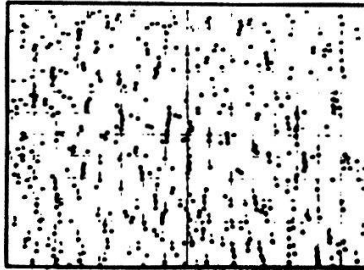
Stahlkugeln von 2 mm Durchmesser werden auf einer mit Rizinusöl bedeckten Fläche zufallsverteilt einem homogenen Magnetfeld bis maximal $3.4 \cdot 10^{-2}$ Tesla ausgesetzt. Sie lagern sich zu Strängen unterschiedlicher Länge zusammen (s. Abb.1a). Die Zusammenlagerung wird dadurch verstärkt, daß das äußere Magnetfeld vergrößert wird. Es wird beobachtet, daß immer ein kleinerer Strang an einen größeren ankoppelt, was durch eine von der Länge des Strangs abhängige Haftreibung zu erklären ist. Dieses Verhalten wird als Selbstverstärkung bezeichnet.

1.2. Modell

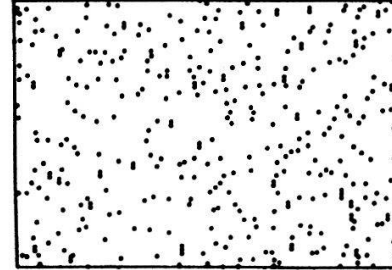
Die Stahlkugeln werden im äußeren Feld magnetisiert. Die Dipolmomente werden parallel ausgerichtet. Zweckmäßig wird im folgenden nur die Dipol-Dipol-Wechselwirkungskraft berücksichtigt. Als Modell für die Computersimulation legten wir einen rechteckigen Einzugsbereich um jede Kugel bzw. Strang, innerhalb dessen jedes andere Teilchen angezogen wird. Die Grenzen des Einzugsbereichs werden bestimmt von der Haftreibung und der Dipol-Dipol-Wechselwirkung und sind in guter Näherung ein Rechteck. Wird ein Teilchen angelagert, wird der

Strang parallel zum äußeren Magnetfeld verlängert.

Wie aus dem Bildvergleich ersichtlich, liefert die Simulation gute Ergebnisse. Die Häufigkeitsverteilungen der Stranglängen befinden sich ebenfalls in guter Übereinstimmung.



$B = 1.7 \cdot 10^{-2}$ Tesla



$B = 3.4 \cdot 10^{-2}$ Tesla

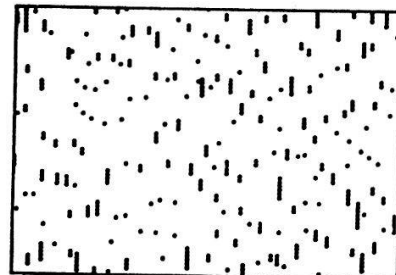


Abb. 1 a) Experiment

b) Simulation

2. Metallteilchen im elektrischen Feld

2.1. Experiment

Auf eine Plexiglasplatte mit den Abmessungen 20 cm x 20 cm x 3 mm werden 15 ml Rizinusöl aufgetragen. Die Stahlkugeln mit 1 mm Durchmesser werden gleichmäßig auf der Ölschicht verteilt. An einer Seite ist ein geerdeter Kupferstab angebracht. Dieser ist mit einer Metallplatte in leitender Verbindung. Eine homogene Aufsprühung von Ladungsträgern erfolgt durch zwei versilberte Kupferdrähte, die in 7.5 cm Höhe und in 8 cm bzw. 10 cm Abstand von der Kupferelektrode über der Platte gespannt werden und an die unter Schutzgas (N_2) bis 25 kV Spannung angelegt werden. Die Kugeln lagern sich von der

Kupferelektrode ausgehend zu Dendriten zusammen, deren Struktur von der Kugeldichte abhängig ist. (s. Abb. 2a)

2.2 Modell

Im Computerprogramm werden zwei Arten von Teilchen definiert: Bereits zu Dendriten strukturierte und Kandidaten dafür. Letztere werden am Anfang zufällig über die Fläche verteilt.

Die Programmschleife beginnt damit, zufällig ein bereits im Dendriten befindliches Teilchen auszuwählen. Um dieses wird ein kreisförmiger Einzugsbereich gelegt, innerhalb dessen Kandidaten angezogen werden. Es wird angenommen, daß die Größe des Einzugsbereichs von der Haftreibung und von einem Feldgradienten, der aus einer Poisson-Gleichung berechnet wird, abhängt. Die Randbedingungen hierfür sind: a) Der Strom verschwindet am Rand

b) Potential der Dendriten und der Kupferelektrode = 0

Falls ein Kandidat innerhalb des Einzugsbereichs gefunden wird, wird er in der Richtung an den Dendriten angelagert, in die der maximale Feldgradient weist und auf Potential Null gesetzt. Nach Lösung der Poisson-Gleichung wird das nächste Teilchen ausgewählt.

Ebenso wie beim Experiment bilden sich bei der Simulation dendritische Strukturen (s. Abb. 2). Eine andere Parallele ist, daß in beiden Fällen "Kandidaten" übrigbleiben. Das ist damit zu erklären, daß der Potentialgradient zu gering wird bzw. der Einzugsbereich nicht mehr ausreicht.

3. Vergleich: Kugeln im Magnetfeld - Kugeln im elektrischen Feld

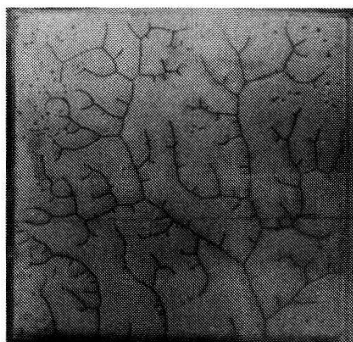
Im Magnetfeld bilden sich Stränge, im E-Feld Dendriten. Wie ist das zu erklären ?

Im Magnetfeld basiert die Anlagerung auf Dipol-Dipol-Wechselwirkung, also ist nur Anlagerung in Richtung des B-Feldes zu erwarten.

Im E-Feld haben wir es mit einer Monopol-Wechselwirkung zu tun, welche isotrop ist und so Anlagerung in verschiedenen Richtungen zuläßt.

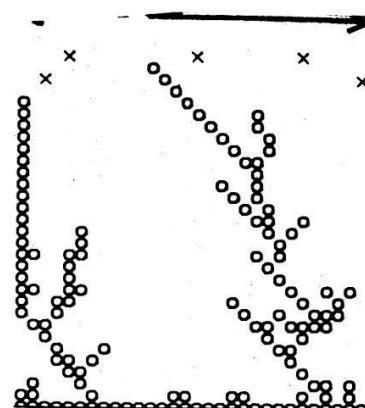
Kugel-
anzahl:

2000

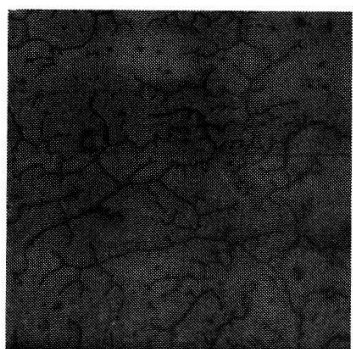


Teilchen-
dichte:

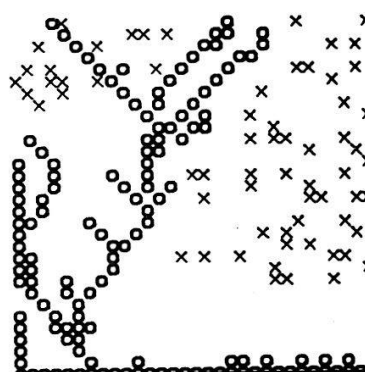
0.12



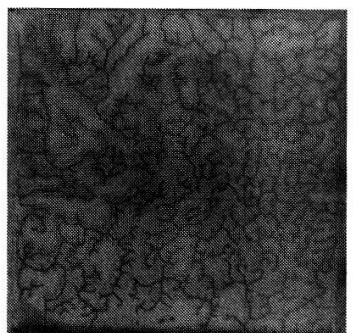
3000



0.18



4000



0.24

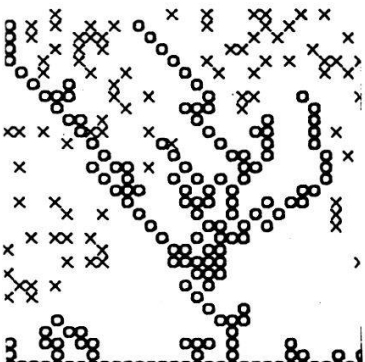


Abb. 2 a) Experiment

b) Simulation

Wir danken für ihre Unterstützung:

O. Wohofsky, P. Deisz, H. Zinner, W. Kroy und der Firma MBB

¹⁾ Teil der Promotionsarbeit

BESCHREIBUNG DENDRITISCHER STRUKTUREN ZÄHER FLUIDE

G. Feuerecker, R. Wittmann, A. Hübler*, E. Lüscher,
Physik-Department TU München, D-8046 Garching.

Überblick : Die Entstehung dendritischer Strukturen wird durch ein hydrodynamisches Modell erklärt und mit einem Computer simuliert. Simulation und Experiment werden mit Hilfe der Fraktalen Dimension verglichen.

1. Einleitung

Zur quantitativen Beschreibung dendritischer Strukturen ist die Analyse großer Datensätze nötig. Mit den Mitteln der Differentialgeometrie ist das oft nicht möglich, da viele dendritische Strukturen sich nicht auf allgemeine geometrische Formen vereinfachen lassen, ohne dabei wesentliche Information zu verlieren. Mandelbrot behauptet, daß die Natur in ihren Formen nicht nur ein anderes Maß, sondern eine vollkommen andere Ebene der Komplexität zeigt /1/. Trotzdem kann die Entstehung einiger sehr komplexer Strukturen mit Hilfe elementarer Gleichungen verstanden und zur Überprüfung des Modells mit einem Computer simuliert werden. Das quantitative Vergleichskriterium ist die Fraktale Dimension, die sich schon zur experimentellen Beschreibung dieser Strukturen bewährt hat /2/.

2. Experiment, die Strukturen.

Zwischen zwei parallelen Platten befindet sich ein Tropfen eines zähen Fluids (Deltinol Langzeit-Fett, NLGI-Grad 2). Die Platten werden auf einen definierten Abstand (zwischen 0.5 mm und 3 mm) zusammengedrückt, so daß ein kreisförmiger Fleck entsteht (Durchmesser 3.5 cm). Zieht man nun die Platten mit einer definierten Geschwindigkeit (1.25 cm/s) auseinander, so wird sich die Fläche, die der Fleck auf den Platten einnimmt, verkleinern. Je nach Wahl

der Versuchsparameter wird sich ein Kreis oder eine mehr oder weniger verzweigte Struktur ausbilden. (Bild 1)

3. Modell und Simulation

Wir betrachten ein zweidimensionales Problem (mit den Platten in der x-y-Ebene). Die Strömung zwischen zwei Platten läßt sich aus der Navier-Stokes-Gleichung (Vernachlässigung von Trägheits- und Gewichtskräften) ableiten:

$$\vec{j} := -\text{grad}(p)/\mu \quad (1), \quad \text{mit } \mu := 12\eta/h^2$$

wobei η die dynamische Viskosität, h den Plattenabstand und $\vec{j}$ die Strömungsgeschwindigkeit darstellt. Da eine Strömung nach z nicht definiert ist, wird diese durch eine Quelle dargestellt. Damit folgt aus der Volumenerhaltung:

$$\text{div}(\vec{j}) := -\dot{h}/h \quad (2). \quad (\text{in } (1))$$

$$\Rightarrow \nabla^2 p := \mu \dot{h}/h \quad (3).$$

Die Oberflächenspannung legt die Randbedingung für den Druck fest. Damit kann die Druckverteilung relativ einfach mit Hilfe eines Relaxationsalgorithmus berechnet werden. Aus (1) ergibt sich die Strömungsgeschwindigkeit am Rand, deren Maximalwert auf 1 Pixel pro Schritt normiert wird. Der Zusammenbruch der horizontalen Strömung (beim 3fachen ursprünglichen Plattenabstand) liefert eine scharfe Abbruchbedingung.

Anschaulich kann man sich die Strukturbildung folgendermaßen vorstellen: Die durch (3) erhaltene Druckverteilung (ohne Oberflächenspannung, d.h. Druck am Rand = 0) begünstigt die Ausbildung von Kanälen, da ein Randpunkt, der durch Fluktuationen in eine beliebig kleine Ausbuchtung gerät, einen größeren Druckgradienten erfährt als die Randpunkte der sonst glatten Oberfläche. Damit wird er schneller nach innen wandern als die übrigen Randpunkte seiner Umgebung, das heißt die Ausbuchtung wird größer, was wiederum einen größeren Druckgradienten bedeutet (destabilisierender Effekt). In Konkurrenz dazu steht der stabilisierende Effekt der Oberflächenspannung (die in die Randbedingung für den Druck eingeht), welche das Ausbilden von Kanälen behindert. Die Form der Struktur ist das Ergebnis der Konkurrenz des stabilisierenden mit dem destabilisierenden Effekt: Sinkende Oberflächenspannung (oder steigendes $\dot{h}$) führen zur Ausbildung immer verzweigter Strukturen. Bemerkenswert ist, daß die Simulation keine Fit-Parameter, sondern nur physikalische Größen enthält.

4. Vergleich von Experiment und Simulation

Als beste objektive Größe zur Beschreibung der Strukturen erkannten wir

die "Fraktale Dimension" D der Kantenlinie, die mit einem Box-counting-Algorithmus /3/ ermittelt wurde.

Diese hat einen für die Struktur charakteristischen Verlauf /2/.

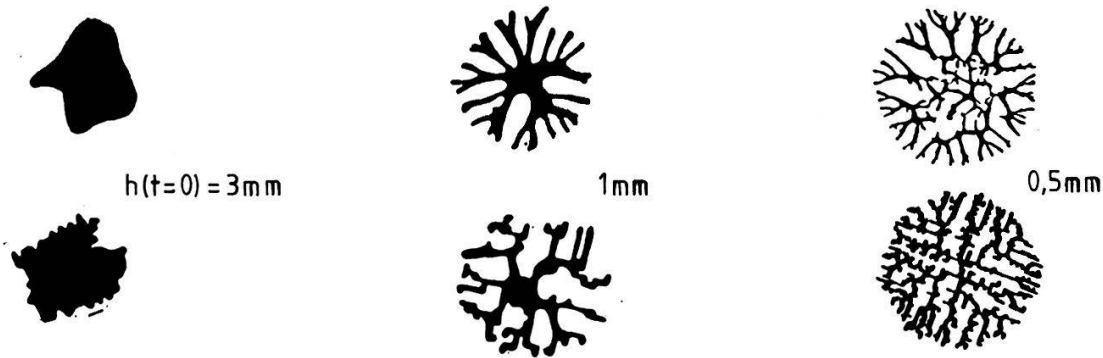


Abb.1: Dendritische Strukturen; oben aus Experiment, unten aus Simulation ($\eta=0.5 \text{ Pa}\cdot\text{s}$; $\sigma=0.05 \text{ N/m}$ geschätzt).

Der Vergleich von Experiment und Simulation zeigt gute Übereinstimmung, sowohl subjektiv - Eindruck beim Betrachten der Strukturen (Abb.1) -, als auch objektiv mit der Fraktalen Dimension als Kriterium: (Abb.2).

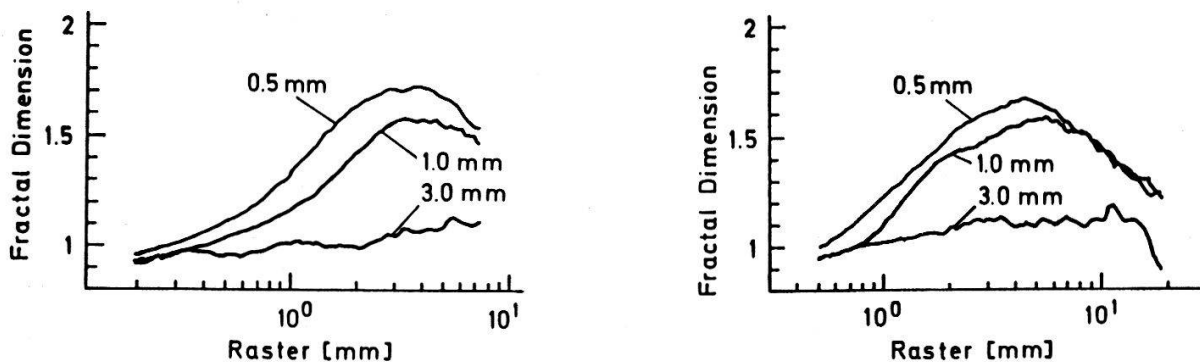


Abb.2: Die Fraktale Dimension von Experiment (links) und Simulation (rechts).

Wir danken Herrn Dr. Kroy, Herrn Dr. Wohofsky und der Firma Messerschmitt-Bölkow-Blohm für Ihre Unterstützung.

*Teil der Promotionsarbeit

5. Schrifttum:

- /1/ B. Mandelbrot: The Fractal Geometry of Nature. Freeman, N.Y. 1983
- /2/ G. Feuerecker, A. Hübler, E. Lüscher: H.P.A. 59 : 128 (1986)
- /3/ K. Klotz, A. Hübler, E. Lüscher: H.P.A. 59 : 124 (1986)

Rekonstruktion von Differentialgleichungen chaotischer
und experimenteller Oszillatoren

T.Kautzky, A.Hübler^{*}, E.Lüscher, Physik-Dept., Technische Universität München,
D-8046 Garching

Überblick : Es wird eine neue Methode vorgestellt mit der, bei deterministischen Systemen aus Datensätzen eine obere Abschätzung ermittelt werden kann. Auch die Koeffizienten der zugrunde liegenden Differentialgleichung (DGL) können ermittelt werden, wenn sich das System durch eine einfache explizite DGL beschreiben läßt. Ferner werden Methoden zur Optimierung der Zustandsraumdarstellung angegeben.

1. Einleitung

In vielen Fällen kann zwar die DGL aus Grundgleichungen hergeleitet, aber nicht allgemein gelöst werden, da das Gleichungssystem nichtlinear ist und daher in der Regel keine Integrale existieren /1,2/. Wenn weder Integrale noch Parameter einer Lösung /3/ zur Beschreibung des Systems verwendet werden können, sind die DGL oder deren Parameter der einzige Satz von Erhaltungsgrößen, abgesehen von statistischen Korrelationen /3/. Haken /4/ zeigte, daß in solchen Systemen oft nur wenige einfache Moden das System beherrschen. Für den Laser und die Benard-Rayleigh-Konvektion hat Haken /5/ wesentlich einfachere DGL aus dem allgemeinen Gleichungssystem für diese wenigen Moden abgeleitet. Da diese nur in der Nähe von Phasenübergängen gelten, die Dynamik eines Systems aber auch sonst augenfällig einfach ist, ist es von Interesse, die Differentialgleichung eines Systems aus dessen Daten zu rekonstruieren. Da die DGL den Tangentialvektor an jedem Punkt im Zustandsraum angibt, benötigt man dazu einen Datensatz, aus dem sich eine Trajektorie im Zustandsraum und deren Tangentialvektoren eindeutig berechnen lassen. Erster Schritt zur Rekonstruktion der DGL ist die Ermittlung der Dimension des Systems.

2. Die Dimension des Systems

Eine untere Schranke dafür ist die fraktale Dimension D_f /2/. Eine obere Schranke erhält man, wenn man die Dimension der Zustandsraumdarstellung so lange erhöht, bis sich die Trajektorie überschneidungsfrei darstellen läßt. Da die Dichte der Punkte im Zustandsraum experimentell beschränkt ist, ist es unwahrscheinlich eine Überschneidung zu finden. Wir führen folgende Größen ein: Der Überschneidungsgrad $U(D, \vec{r}, \vec{s})$ der Tangenten an die Trajektorien zweier benachbarter Punkte im Zustandsraum der Dimension D ist der Betrag der Differenz der Tangentialvektoren der Trajektorien am Punkt $\vec{r}$ bzw. $\vec{s}$.

$U(D, \vec{r}, \vec{s}) = |\vec{t}(\vec{r}) - \vec{t}(\vec{s})|$. Die Überschneidungswahrscheinlichkeit $W_a(D, r)$ ist das Mittel des Überschneidungsgrades U über alle Messpunkte, d.h. einer Untermenge des Zustandsraums. $W_a(D, r) = \lim_{\Delta r \rightarrow 0} \overline{U(D, \vec{r}, \vec{s})}$, $|\vec{r} - \vec{s}| \in [r - \frac{\Delta r}{2}, r + \frac{\Delta r}{2}]$. Die Überschneidungsdimension D_c ist die kleinste Dimension bei der die Rekonstruktion überschneidungsfrei wird, d.h. $D_c = \min\{D | W_a(D, r=0)=0\}$. Da die Punktdichte im Zustandsraum endlich ist, läßt sich der Grenzübergang $r \rightarrow 0$ nicht direkt durchführen, man betrachtet $W_a(D, r)$ als Funktion von r und extrapoliert W_a nach Null. Abbildung 1 zeigt als Beispiel die Überschneidungswahrscheinlichkeit W_a als Funktion des Abstands r für den Lorenzattraktor /6/ für verschiedene Dimensionen des Zustandsraums. Für die dritte und jede weitere Dimension ergibt sich durch Extrapolation $W_a(r=0)=0$. Die maximale Zahl der Freiheitsgrade ist somit drei, wie es dem Lorenzattraktor entspricht, der durch drei DGLn 1. Ordnung beschrieben wird. Diese Wahrscheinlichkeiten wurden bei einem Attraktor aus 15 000 Punkten durch Untersuchung von 450 zufällig gewählten Punkten ermittelt.

3. Optimierung der Darstellung

Um die DGL ermitteln zu können, muß der Attraktor entfaltet sein, d.h. die Krümmung der Trajektorie im Zustandsraum soll möglichst klein sein. Bei großen Krümmungen ändern sich die Tangentialvektoren und damit die Überschneidungswahrscheinlichkeit stark als Funktion vom Abstand r . dW_a/dr kann zur Abschätzung der mittleren Krümmung und damit zur Optimierung der Darstellung verwendet werden.

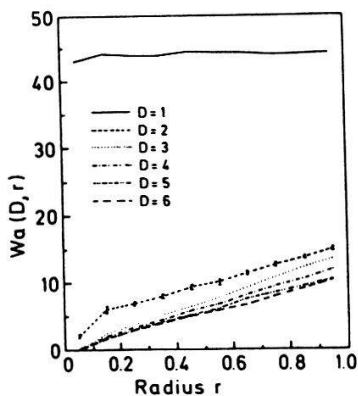


Abb.1
Überschneidungswahrscheinlichkeit
 W_a als Funktion des Abstandes r
für den Lorenzattraktor.

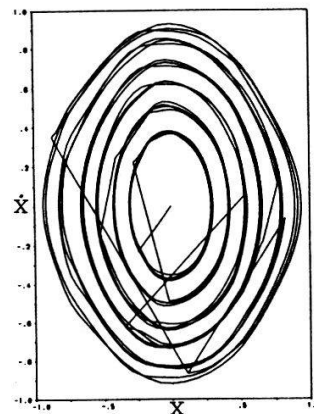


Abb.2 Zustandsraumdarstellung des
experimentell an einem
physikalischen Pendel gemessenen
Datensatzes.

4. Rekonstruktion

Durch numerische Integration des Lorenzattraktors bzw. eines van-der-Pohl-Oszillators wurde ein Datensatz erzeugt und eine Trajektorie im Zustandsraum mit den Koordinaten x, y, z rekonstruiert. Die Anpassung einer Potenzreihe an die Tangentialvektoren der Trajektorie liefert auf 5 geltende Ziffern genau die richtigen Koeffizienten.

5. Experiment

An realen einem physikalischen Pendel wurden Daten aufgenommen (Abb.2). Das Pendel besteht aus einem mittig gelagerten Aluminiumstab mit .7 m Länge und .9 kg Masse. An einem Ende ist eine Masse von .6 kg angebracht. Die Daten wurden mit einem Potentiometer mit einer Messfrequenz von 30 Hz aufgenommen. Um den Zustandsraum gut auszufüllen wurden die Daten aus einzelnen Sätzen zusammengestellt, der größte mit einem Maximalausschlag von 2.5 rad, der kleinste mit einem Maximalausschlag von .09 rad. Zum Vergleich wurde ein möglichst ähnlicher Datensatz durch numerische Integration des DGL-Systems $\dot{x}_1 = x_2$, $\dot{x}_2 = -bx_2 - w^2 \sin(x_1)$, mit $b = .004$, $w = .125$, erzeugt und mit 1% Rauschen überlagert. Der simulierte und der experimentelle Datensatz wurden auf den Einheitsintervall normiert, um Legendrepolynome anzupassen. Der Fit liefert folgende Koeffizienten a_{ij} (nur betragsmäßig größere als .001 sind aufgeführt).

simulierte Daten experimentelle Daten angepasste Funktion

i j	a_{ij}	i j	a_{ij}	$f = \sum_{ij} a_{ij} P_i(x_1/a) P_j(x_2/b)$
1 0	-.018	1 0	-.019	Normierungsfaktoren $a=2.5$ $b=.25$
1 2	.0	1 2	.001	
2 1	-.001	2 1	-.003	
3 0	.013	3 0	.012	

Man kann erkennen, daß die Koeffizienten von Simulation und Experiment im Wesentlichen übereinstimmen.

Wir bedanken uns bei Herrn Dr.O.Wohofsky und Herrn P.Deisz.

* Teil der Promotionsarbeit

/1/ Landau-Lifschitz, Lehrbuch der theoretischen Physik, Bd.1
Mechanik, 9.Aufl., Akademie-Verlag, Berlin(1979)

/2/ G. Eilenberger in Nichtlineare Dynamik in kondensierter Materie
Kernforschungsanlage Jülich, Jülich(1983)

/3/ P. Grassberger, I. Procaccia, Phys.Rev.Lett.50,346(1983)
Y. Termonia, Phys.Rev.A9,1612(1984)

/4/ H. Haken, Synergetics, An Introduction, 2.edition, p.175, Springer,
Berlin(1978)

/5/ wie /3/ p. 225 ff

/6/ E. N. Lorenz, J. Atmos. Sci. 20,130(1963)

ÜBER DIE STEUERUNG NICHTLINEARER SCHWINGER

A. Hübler^{*}, G. Reiser, E. Lüscher

Physik-Dept. El3, Technische Universität München, D- 8046 Garching

Abstract: Es wird ein Verfahren vorgestellt, mit dem nichtlineare gedämpfte Schwinger optimal, d.h. mit minimaler Blindleistung gesteuert werden können. Das Verfahren eignet sich auch zur Resonanzspektroskopie bei nichtlinearen Oszillatoren.

1. Einleitung

Die Anregung eines gedämpften harmonischen Oszillators zu einer bestimmten Schwingungsamplitude oder die Entnahme von Energie geschieht am günstigsten durch einen Antrieb mit der Resonanzfrequenz des Oszillators. Dann sind die damit verbundenen Blindleistungen und Blindleistungsverluste am kleinsten. Nichtlineare Oszillatoren besitzen keine Resonanzfrequenz. Die Eigenfrequenz ist, falls sie überhaupt sinnvoll definiert werden kann, abhängig von der Schwingungsamplitude. Heuristisch gesehen, müßte man die Antriebsfrequenz im Laufe der Zeit so verstellen, daß sie ständig mit der Eigenfrequenz übereinstimmt.

2. Resonanzen nichtlinearer gedämpfter Schwinger

Läßt man einen anharmonischen gedämpften Schwinger $\vec{x}$ aus einem angeregten Zustand abklingen,

$$(1) \quad d\vec{x}/dt^* = \vec{g}(\vec{x}, T-t^*, \vec{a}^*), \quad \vec{a} = \text{Parameter}$$

so besitzt das zeitgespiegelte Zeitdifferential der Amplitude

$$(2) \quad \vec{F}(t^*) = -\vec{g}(\vec{x}, T-t^*, \vec{a}) - \vec{g}(\vec{x}, T-t^*, \vec{a}^0)$$

genau jenes Zeitverhalten, das man zum Antrieb eines gleichartigen Schwingers $\vec{y}$

$$(3) \quad d\vec{y}/dt = \vec{f}(\vec{y}, t, \vec{a}^0) \text{ benötigt}$$

Für

$$(4) \quad d\vec{y}/dt = \vec{f}(\vec{y}, t) + \vec{F}(\vec{x}, t^* = T-t)$$

gilt

$$(5) \quad \vec{y}(t) = \vec{x}(T-t) \text{ ist Lösung für } \vec{f} = \vec{g}$$

(6) Hypothese: a) Die Lösung (5) ist stabil

b) Bei gedämpften Potentialschwingern ist der Antrieb resonant.

Wir nennen einen Antrieb resonant, wenn die Absorptionsgüte $Q(T) = E(T) / T \cdot B(T)$

(7) extremal ist. $E(T)$ ist jene Energie, die im Zeitintervall $[0, T]$ vom Antrieb auf den Oszillator übertragen wurde. Die Blindleistung B wird folgendermaßen definiert:

$$(8) \quad B_{1,2}(T) = \left| \frac{1}{T} \int_0^T dE/dt \cdot \Theta(\pm dE/dt) dt \right|, \quad B(T) = \min(B_1, B_2), \quad \Theta = \text{Stufenfkt.}$$

3. Die Steuerung gedämpfter nichtlinearer Oszillatoren

Möchte man das experimentelle System $\vec{y}$ mit $d\vec{y}/dt = \vec{f}(\vec{y}, t)$, das sich in der Umgebung des Zustands $\vec{y}_0$ befindet, in den Zustand $\vec{y}_1$ bringen, so wird dabei folgendermaßen vorgegangen:

1. Die Differentialgleichung $d\vec{x}/dt^* = \vec{f}(\vec{x}, t^*, \vec{a})$ wird gelöst für $\vec{x}(t^*=0) = \vec{y}_1$,
 $\vec{x}(t^*=T) \approx \vec{y}_0$.

2. Aus dem Datensatz $\vec{x}(t^*)$ wird nach (2) der Antrieb des experimentellen Systems berechnet.

Mit der Konstante $\vec{a}$ kann die Geschwindigkeit, mit der das System den gewünschten Endzustand erreicht, eingestellt werden. Kleine zeitliche Variationen von $\vec{a}$ zerstören die Stabilität der Lösung in der Regel nicht. Damit kann $\vec{a}$ zur Steuerung des nichtlinearen Systems benutzt werden.

4. Numerische Beispiele

Möchte man einen eindimensionalen nichtlinearen Oszillator

$$(9) \quad d^2y/dt^2 + 0.002 dy/dt - 10y + 10y^3 = 0$$

der sich in der Nähe des Grundzustands y_0 befindet, $|y(t=0) - y_0| < \mu$,

zu einer Schwingung mit der Maximalamplitude y_1 anregen, so ergibt sich:

$$(10) \quad d^2/dt^2 y(t) + 0.002 d/dt y(t) - 10y(t) + 10y(t)^3 = -0.002(a+1) d/dt^* x(t^* = T-t)$$

$$\text{mit (11) } (d/dt^*)^2 x(t^*) + 0.002a d/dt^* x(t^*) - Ax(t^*) + Bx(t^*)^3 = 0$$

Zunächst wird nun (10) für $A=B=10$ numerisch gelöst. Die numerische Integration startet von $x(t^*=0)=y_1$ und bricht zu dem Zeitpunkt T ab, wenn gilt $|x-y_0| \ll \mu$.

Aus dem Datensatz $x(t^*)$ läßt sich nach (2) der Antrieb berechnen. In Abb. 1 ist die Anregung eines multistabilen Oszillators dargestellt.

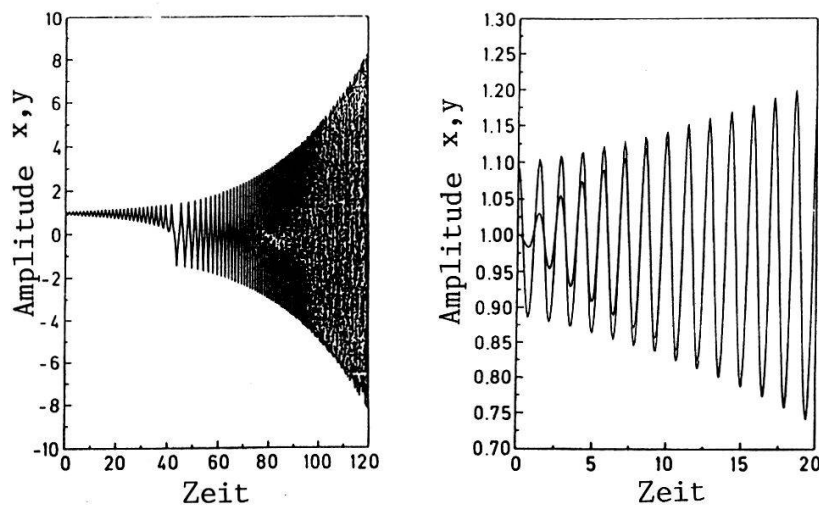


Abb.1 Resonante Anregung eines nichtlinearen Oszillators nach Gl.(10), $a=0.5$

Mit dem Steuerparameter a kann eingestellt werden, wie schnell das System Energie aufnimmt bzw. abgibt (Abb. 2). Für $a > 1$ nimmt der Oszillator vom Antrieb Energie auf und die Schwingungsamplitude wächst. Für $0 < a < 1$ nimmt der Oszillator vom Antrieb zwar Energie auf, die Schwingungsamplitude fällt dennoch ab. Für $a < 0$ wird der Oszillator vom Antrieb gebremst, die Schwingungsamplitude fällt stark ab.

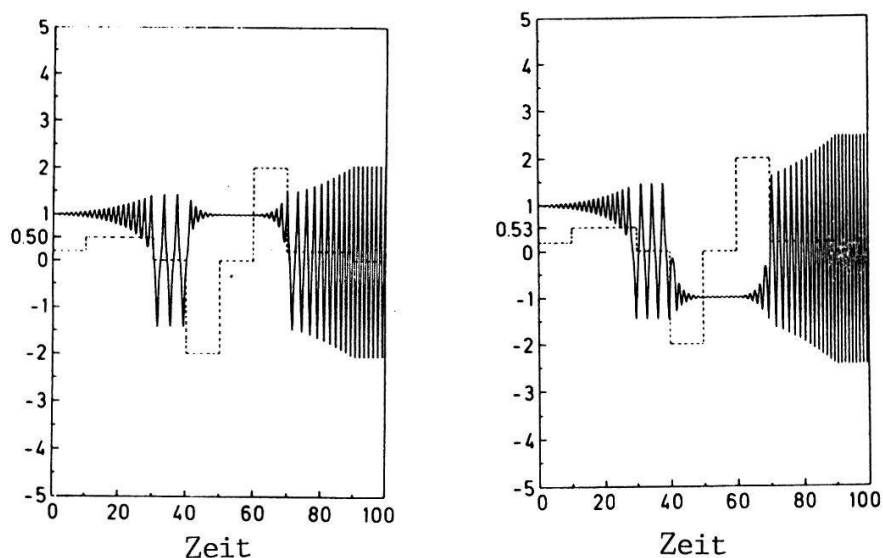


Abb.2 Die Steuerung eines multistabilen Schwingers (10) in zwei Beispielen. Dargestellt ist die Zeitabhängigkeit des Steuerparameters a (---) und der Schwingungsamplitude (—).

5. Resonanzspektroskopie

Bisher sind wir davon ausgegangen, daß die Parameter der Differentialgleichungen des experimentellen Systems bekannt sind. Stimmen die Parameter jener Differentialgleichung, die zur Berechnung des Antriebs benutzt werden, und jene Parameter, die das experimentelle System beschreiben, nicht genau überein, so ist der Antrieb nicht resonant und in der Regel auch nicht stabil. Durch eine systematische Variation der Parameter jener Differentialgleichung, die zur Bestimmung des Antriebs benutzt wird, können die Resonanz und damit auch die Parameter der Differentialgleichung des experimentellen Systems ermittelt werden (Abb. 3), wobei sich das experimentelle System vor jeder Anregung in der Nähe des Grundzustands befinden soll. Der Antrieb wird mit Hilfe der Differentialgleichung (11) berechnet, wobei bei jeder Einzelanregung a so eingestellt wird, daß das System bei Resonanz den Potentialberg gerade erreicht ($a = 0.5$ für $V=(x_t)^2/2 - 10x^2/2 + 10x^4/4 < 0.04$; $a=0$ sonst).

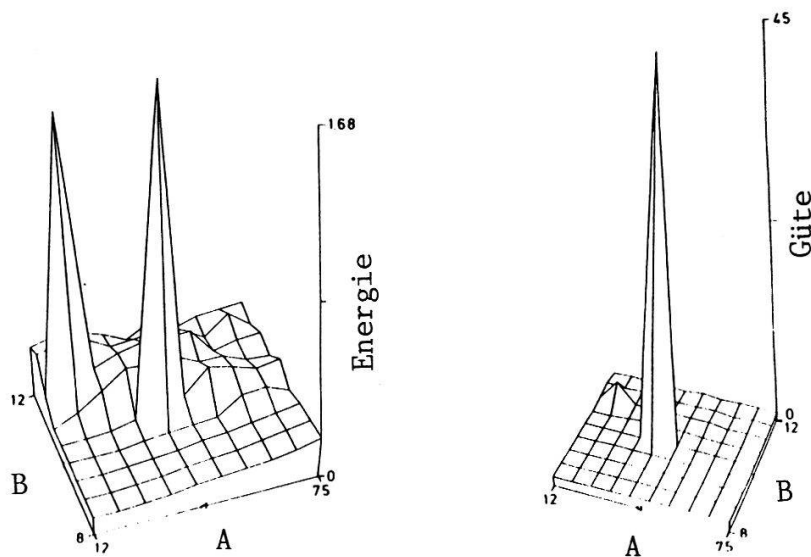


Abb. 3 Die Schwingungsamplitude und der Logarithmus der Güte gemittelt über 30 Zeitschritte als Funktion der Modellparameter A und B.

Für Diskussionsbeiträge und Unterstützungen bedanken wir uns bei Dr. W. Kroy, Dr. H. Zinner, Dr. O. Wohofsky und bei der Firma MBB.

/1/ Hans Jenny, Kymatik, Basilius Presse, Basel, 1967

(* Teil der Promotionsarbeit)

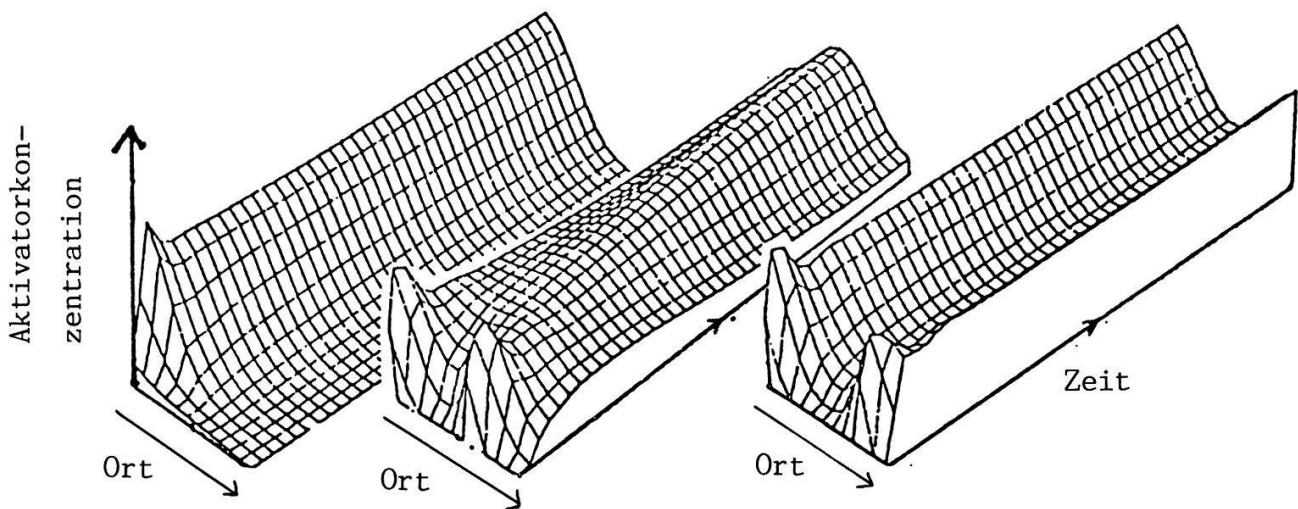
Stationäre Zustände in berandeten, normierten Systemen

W. Stelzel, H. Kainzbauer, A. Hübler*, E. Lüscher, Physik-Depart. TU München
D-8046 Garching

Abstract: Es werden quantisierte klassische Systeme vorgestellt und ein Weg zur Übertragung der Mathematik der Quantenmechanik auf klassische Systeme aufgezeigt

1. Einleitung

Neuere Modelle über Strukturbildung, wie beispielsweise das Modell von Gierer und Meinhardt /1/, zeigen bei numerischen Simulationen ein Verhalten, das an quantenmechanische Systeme erinnert.



Parameter der Simulation: $p=0,003$; $\mu=0,01$; $p_o=0,0001$; $p_I=0,0$; $k=0,001$; $D_a=0,02$
 $p'=0,001$; $D_h=0,4$; $v=0,02$

Es ergeben sich, je nach Anfangsbedingungen, hochsymmetrische stationäre Zustände. Aufgrund dieser Analogie wollen wir untersuchen, ob es möglich ist, die Mathematik der Quantenmechanik zur Berechnung klassischer Systeme zu verwenden.

Die Lösung einer Differentialgleichung ist, nach Eilenberger /2/, gleichbedeutend mit der Suche nach Erhaltungsgrößen.

2. Erhaltungsgrößen in homogenen Systemen

Für ein System in $h(x,y)$, das nicht explizit von x und y , aber von beliebigen Ableitungen nach x und y abhängt, existiert eine Erhaltungsgröße H in y mit $dH/dy=0$:

$$\begin{aligned}
 (1) \quad H = & \int_1^2 \left[-L + \sum_{u=1}^n \sum_{v=0}^n (\partial L / \partial h_{u,v}) h_{u,v} + \right. \\
 & \sum_{v=0}^n \sum_{u=2}^n \sum_{s=1}^{u-1} (-1)^{v+s} ((d/dx)^v (d/dy)^s \partial L / \partial h_{u,v}) h_{u+s,0} \Big] dx \\
 & + \int \left[\sum_{v=1}^n \sum_{r=0}^{v-1} (-1)^r ((d/dx)^r \partial L / \partial h_{0,v}) h_{1,v-r-1} \right] dy \\
 & + \int \left[\sum_{v=1}^n \sum_{r=0}^{v-1} \sum_{u=1}^n (-1)^{r+1} (d/dy (d/dx)^r \partial L / \partial h_{u,v}) h_{u,v-r-1} \right] dy
 \end{aligned}$$

mit der Nomenklatur: (2) $h_{u,v} = (d/dy)^u (d/dx)^v h$

Zum Beweis benötigt man das Hamiltonsche Variationsprinzip mit den üblichen Einschränkungen der Variation am Rand, und die daraus resultierende erweiterte Lagrangesche Gleichung.

Beispielsweise ist bei einem zeitunabhängigen System mit $L = -h^2 - h_x^2$ (elastische Schnur in parabelförmigem Kanal) die Differenz aus potentieller Energie und Wechselwirkungsenergie im Raum erhalten.

3. Klassische, harmonische Systeme3.a) Klassische Schrödingergleichung

Im folgenden wird immer vorausgesetzt, daß $h_{u,v}$ für $u,v < n$ an den Rändern verschwindet.

Für ein klassisches System, das nicht explizit von der Zeit abhängt erhält man mit der Nebenbedingung, daß das räumliche und zeitliche Quadratmittel der Amplitude konstant ist, (3) $\int h^2 dx dt = \text{konstant}$, folgende Bewegungsgleichung:

$$(4) \quad \sum_{u=0}^n \sum_{v=0}^n (-1)^{v+u} ((d/dx)^v (d/dy)^u \partial L / \partial h_{u,v}) - \lambda h = 0$$

wobei λ der Eulersche Multiplikator ist, mit dem die Zwangsbedingung an die Bewegungsgleichung angeschlossen wurde. Betrachtet man beispielsweise ein Feld in h mit folgender Lagrangefunktion

$$(5) \quad L = a(x,t)/2 h_t^2 - b(x,t)/2 h_x^2 - c(x,t)/2 h^2$$

so kommt man nach Abspalten eines schnell oszillierenden Anteils /3/ $h(x,t) = \varphi(x,t) \exp(-i\omega t)$ mit der Näherung $\varphi_t \ll \omega \varphi$, wobei $a\omega^2$ dem konstanten Teil von $c(x,t)$ entspricht ($c - a\omega^2 = d(x,t)$), zu

$$(6) (i\omega\varphi - \varphi_t)a_t + 2i\omega a\varphi_t + b_x\varphi_x + b\varphi_{xx} - d\varphi = \lambda\varphi$$

Für Systeme mit $a_t = b_x = 0$ findet man

$$(7) 2i\omega a\varphi_t = -b\varphi_{xx} + (d + \lambda)\varphi$$

was formal einer Schrödingergleichung mit orts- und zeitabhängigem Potential $d + \lambda$ entspricht und, falls man Operatoren äquivalent zur Quantenmechanik definiert, mit dem entsprechenden Formalismus gelöst werden kann.

Die klassische Schrödingergleichung stellt ein Kräftegleichgewicht dar.

$H\varphi = -b\varphi_{xx} + (d + \lambda)\varphi = E\varphi \triangleq$ gesamte, inhomogene Potentialkraft + Zwangskraft = modulierte Trägheitskraft.

Der Erwartungswert von $H \int \varphi H \varphi dx = \int \varphi (-b\varphi_{xx} + d\varphi + \lambda\varphi) dx = \int (b\varphi_x^2 + d\varphi^2 + \lambda\varphi^2) dx =$ Energie aus dem ortsabhängigen Teil der Potentiale und der Zwangskraft.

Die Lösungen der Schrödingergleichung kann man nach Eigenfunktionen des Systems entwickeln. Die Eigenfunktionen bilden ein orthogonales, vollständiges Funktionensystem /4/. Da die Schrödingergleichung eine lineare Differentialgleichung ist, gilt das Superpositionsprinzip. Mit dem Fouriertheorem und der erwähnten Vollständigkeit sind beliebige Funktionen als Mischung der Lösungsfunktionen darstellbar und damit ebenfalls Lösungen der Schrödingergleichung. Man erhält hier also noch keine Quantisierung.

Betrachtet man allerdings Systeme mit homogenem Potential oder verlangt in einer weiteren Nebenbedingung extremale Energie, so erhält man eine stationäre Schrödingergleichung und Quantisierung.

3.b) Klassische Unschärferelation

Für ein derartiges System kann man, genauso wie in der Quantenmechanik, Vertauschungsrelationen ableiten; z.B.: $[x, p] = -b$

Aus dieser Vertauschungsrelation erhält man eine Unschärferelation für die Wechselwirkungskraft, da $(\Delta F)^2 = (\Delta p)^2 : (\Delta x)^2 (\Delta F)^2 \geq b^2/4$.

Hierbei bedeutet Δx die Varianz des mit dem Quadratmittel der Feldamplitude gewichteten Orts und ΔF die Varianz der Wechselwirkungskraft im Raum:

$$(\Delta x)^2 = \int x^2 h^2 dx - (\int x h^2 dx)^2, (\Delta F)^2 = \int h_x^2 dx - (\int h_x dx)^2$$

Die Unschärferelation fordert, daß die lokalen Unterschiede in der Wechselwirkungskraft groß sein müssen, wenn der Bereich großer Feldamplituden auf kleinem Raum begrenzt ist, bzw. daß der Bereich nennenswerter Feldamplituden einen großen Raum einnimmt, falls die Unterschiede in der Wechselwirkungskraft klein sind.

3.c) Schwingende Saite

Eine schwingende Saite, die, bis auf eine Perle, vollständig mit Perlen aufgefüllt ist, wird mit folgender Lagrangefunktion beschrieben:

$$(8) L = \int \left(-a/2 \dot{y}_x^2 + \rho/2 \dot{y}_t^2 + m d(x-x_0)/2 \dot{y}_t^2 \right) dx + m/2 (\dot{x}_0)_t^2$$

wobei $y(x,t)$ die Auslenkung der Saite und x_0 der Ort der fehlenden Perle, im folgenden mit "Loch" bezeichnet, ist.

Bei kleinen Massen der Perlen und großer Reibungskraft $\gamma (\dot{x}_0)_t$ kann man die Lösungen des Systems mit einem Separationsansatz und der Störungstheorie berechnen. Sitzt das Loch in einem Schwingungsknoten, so wird die Bewegung der übrigen Saite durch das Loch nicht gestört; es ergeben sich stabile stationäre Zustände, bei denen sich das Loch nicht bewegt.

4. Nichtlineare Felder

Über die Beschreibung linearer Felder hinaus wäre z.B. die Anwendung der Mathematik der Quantenmechanik auf das zu Beginn erwähnte Strukturbildungsmodell von Gierer und Meinhardt interessant. Leider ist dies wegen der Nichtlinearität und der damit verbundenen Probleme bis jetzt nicht gelungen.

Die numerischen Simulationen zum Modell von Gierer und Meinhardt führte R. Stöckel durch. Wir danken Herrn O. Wohofsky, der Firma MBB und Herrn P. Deisz. * Teil der Promotionsarbeit

/1/ H. Meinhardt und A. Gierer, Models of Biological Patternformation, Academic Press INC, London, 1982, Seite 10-17

/2/ G. Eilenberger in Nichtlineare Dynamik in kondensierter Materie, Kernforschungsanlage Jülich, Jülich, 1983

/3/ A.S. Dawydow, Quantenmechanik, 5. Auflage, Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1978, Seite 216,217

/4/ W. Greiner, Theoretische Physik, Band 4, Quantenmechanik 1, 3.Auflage, Verlag Harri Deutsch, Frankfurt am Main, Seite 83,84

SELBSTSTRUKTURIERUNG EINER PULVERSCHICHT AUF EINER HOMOGEN SCHWINGENDEN PLATTE

F. Dinkelacker, A. Hübler^{*}, E. Lüscher

Physik-Department, Technische Universität München, D - 8046 Garching

Überblick: Dissipative Strukturen aus feinem Pulver auf einer homogen schwingenden Platte werden experimentell untersucht. Mit Hilfe einer dichteabhängigen Diffusionskonstante bzw. dem Prinzip extremaler Ankopplung wird versucht, die entstehenden Strukturen zu erklären.

1. Einleitung

H. Jenny /1/ beobachtete 1967, daß Pulver sich auf einer schwingenden Platte zu hügelförmigen Gebilden zusammenzieht. Wir haben dieses Phänomen der Selbstverstärkung quantitativ untersucht.

2. Experimente

Eine horizontal aufgestellte Plexiglasplatte ist auf einem Lautsprecher befestigt und schwingt mit 50 bis 300 Hz homogen auf und ab. Es können Maximalbeschleunigungen bis zu 10 g erzeugt werden. Streut man 0.5 mm dick Lycopodiumpulver auf die Platte und erhöht langsam die Schwingungsamplitude, so sind zwei Phasenübergänge zu beobachten (Abb. 1). Bei 5 g entstehen aus der homogenen Anfangsverteilung scharf berandete Gebiete. Bei 8 g Maximalbeschleunigung ziehen sich die Gebiete zu Hügeln mit starker Konvektion zusammen.

Abb. 2 zeigt die Entwicklung, ausgehend von einer kegelförmigen Anfangsverteilung.

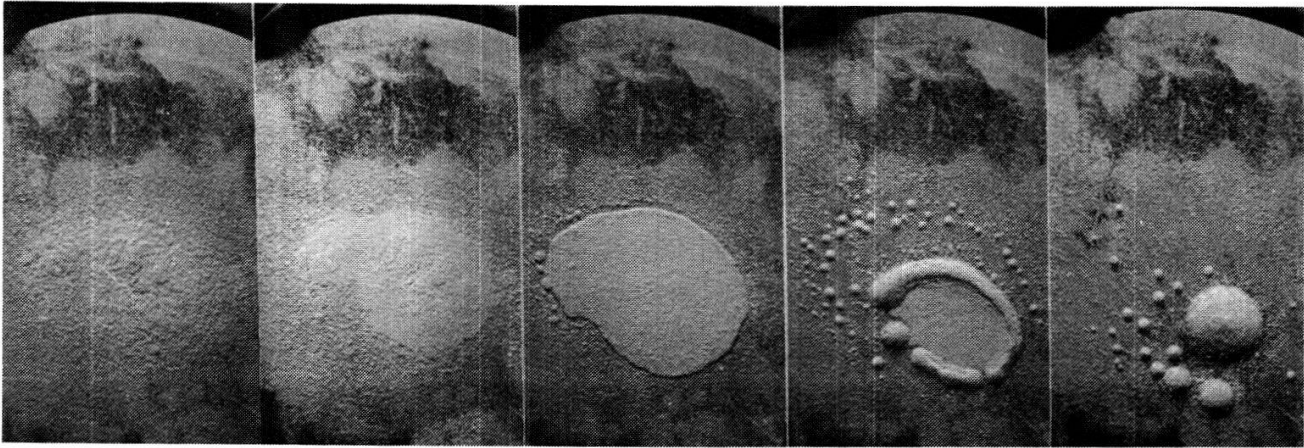


Abb. 1 a) b) c) d) $\longleftrightarrow$ 1 cm e)

Strukturentstehung bei steigender Schwingungsstärke, $f = 85$ Hz, a) Lycopodium aufgestreut $a=3g$, b) $a=5g$, c) $a=8g$, scharfer Rand, d) $a=10g$ Phasenübergang zum Konvektionshügel, e) $a=10g$, 7 sek. später, stationäre Konvektionshügel.

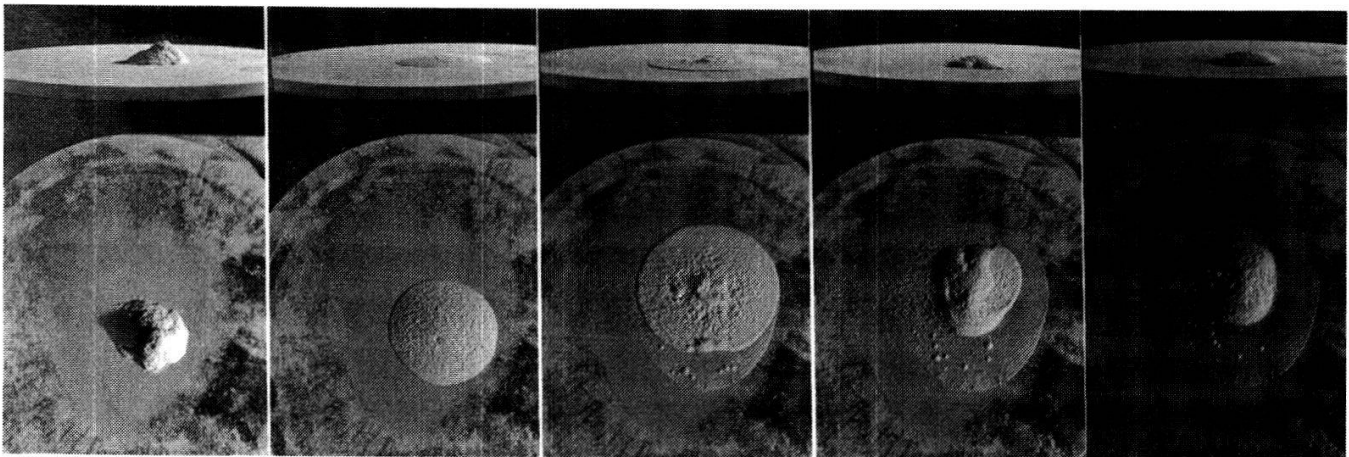


Abb. 2 a) b) c) d) e)

Auseinandergehen und Zusammenziehen, $f = 85$ Hz, a) $a=0g$, Schüttkegel, b) $a=3g$, c) $a=8g$, d) $a=8g$, 10 sek. später, e) $a=8g$ 20 sek. später.

3. Modelle

3.1 Dichteabhängige Diffusionskonstante

Nimmt man teilelastische Stöße zwischen den Teilchen an, so nimmt der Impulsübertrag auf das oberste (diffundierende) Teilchen mit der Schichtdicke ab. Interpretiert man die Schichtdicke in einem zweidimensionalen Modell als Teilchendichte, so erhält man ein System mit dichteabhängiger Diffusionskonstante [2]. Diese Diffusionskonstante sinkt mit steigender Dichte. Dies führt zur Clusterbildung.

3.2 Prinzip extremaler Ankopplung

Wir nehmen ein System an, das durch die Lagrangegleichung

$$\delta S = \delta \int (L_1(h_i) + L_2(h_i, h_j, t)) dt = 0$$

und Reibungskräfte beschrieben werden kann. Hierbei sind h_i die inneren Freiheitsgrade und h_j die äußeren Freiheitsgrade. Wenn ein Zustand stationär ist, d.h. wenn für alle inneren Freiheitsgrade h_i die Variation der Lagrangefunktion L_1 verschwindet, L_1 nicht explizit von der Zeit abhängt und somit Erhaltungsgrößen existieren und die Dissipation sich als substantielle Ableitung der Funktion L_3 darstellen läßt, dann ist das Wechselwirkungspotential $L_2 + L_3$ extremal, d.h. die substantielle Ableitung nach h_i verschwindet.

Je größer die Schichtdicke ist, umso geringer ist die Ankopplung der Teilchen an die schwingende Platte, falls die Stöße zwischen den Teilchen inelastisch sind. Dementgegen wirkt die Ankopplung an das Schwerfeld. Stationäre Zustände sind dadurch gekennzeichnet, daß die Gesamtankopplung extremal wird.

Wir danken O. Wohofsky und die Firma MBB für Unterstützung.

* Teil der Promotionsarbeit von A. Hübler.

Literatur

- /1/ Hans Jenny, Kymatik, Basilius Presse, Basel, 1967
- /2/ F. Dinkelacker, A. Hübler, E. Lüscher, Pattern Formation of Powder on a Vibrating Disc, erscheint in Biological Cybernetics.

QUASI-NUMERISCHES NÄHERUNGSVERFAHREN ZUR UMWANDLUNG VON GEWÖHNLICHEN DIFFERENTIALGLEICHUNGEN IN DIFFERENZENGLEICHUNGEN

W.Eberl, A.Hübler*, E.Lüscher, Physik-Dept.

Technische Universität München, D-8046 Garching

M.Maurer, MAN Technologie GmbH, EDP D-8000 München

Abstract: Gewöhnliche Differentialgleichungen vom Typ $dx/dt = f(x,t)$, die bisher nur numerisch gelöst werden konnten, werden jetzt durch ein analytisches Approximationsverfahren in Differenzengleichungen übergeführt.

1. Einleitung

Nichtlineare Differentialgleichungen (DGLn) können in der Regel nicht exakt analytisch gelöst werden (/1/,/2/). Andererseits kann das zeitliche Verhalten oft durch einfache Differenzengleichungen (DiGLn) beschrieben werden (/3/,/4/,/5/).

Ein gutes Beispiel dazu ist das System eines unkonventionell betriebenen Wobblers, der mit numerischen Verfahren studiert wurde. Die DGL hierzu lautet: $d^2x/dt^2 - 0.2(16-x^2-w^2x^2) dx/dt + w^2x = 0$; $w=2+w_1\sin(2t)$ (1a,1b)

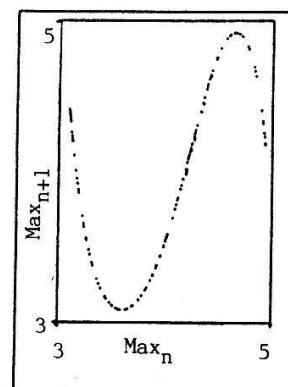
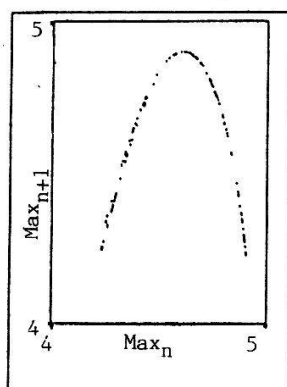
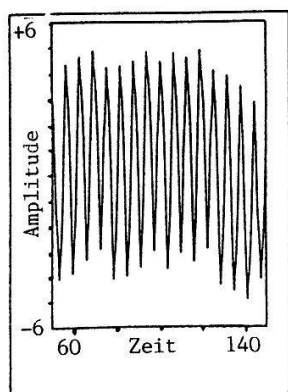


Abb. 1: links: Schwingung des Wobblers (1a,1b) für $w_1=1.55$
 mitte: Next-Maxima-Abbildung des Wobblers für $w_1=1.55$
 rechts: Next-Maxima-Abbildung des Wobblers für $w_1=1.54$

Obwohl hier die Schwingungsmaxima chaotisch aufeinanderfolgen, ergibt sich eine sehr einfache, gut durch eine Parabel zu approximierende Next-Maxima-Abbildung.

Der Schritt von der DGL zur DiGL konnte bisher nur für einen einzigen Parametersatz numerisch ausgeführt werden. Jetzt ist es erstmals gelungen, diesen Schritt analytisch durchzuführen.

Zuerst wollen wir die Probleme dieser Umwandlung allgemein diskutieren, um nachher einige Beispiele für die Anwendung des Verfahrens zu zeigen.

2. Analytische Integration durch Bestapproximation

Gegeben sei die explizite DGL: $dx/dt = F(x,t)$ (2)

Unser Ziel ist, die Funktion $I: x(t) \rightarrow x(t+T)$ oder $x(t+T) = I(x(t))$ zu erhalten. Dabei soll T relativ gross sein, z.B. die Periode einer Schwingung. Es lassen sich dazu beliebige numerische Verfahren einsetzen, z.B. Runge-Kutta-Verfahren. Der Einfachheit halber wollen wir hier die Lösung mit einem einstufigen Differenzenverfahren (vgl. z.B. /6/, Seite 200f.) erläutern. Mit $h=T/n$ läßt sich die DGL (2) umschreiben in:

$$x(t+h) = x(t) + h * F(x(t),t) \quad (3) \quad \text{mit } x(t=0) = x_0 \quad (4)$$

Dieses Iteration n mal wiederholt liefert $x(t+T)$. Will man dieses Verfahren analytisch durchführen, so stellt man fest, daß der Grad der Polynome und die Anzahl der Terme exponentiell mit der Anzahl der Zeitschritte zunehmen, wenn die Funktion F nicht linear in x ist. In der Numerik hat man eigentlich dieses Problem auch, weil sich dort die Anzahl Ziffern in gleicher Weise erhöht.

Durch Rundung der Ergebnisse entstehen Unschärfebereiche. Durch diese Bereiche kann man ein aus Tschebysheff-Polynomen zusammengesetzte Approximationsfunktion legen. Mit dem so erhaltenen, kleineren Polynom wieder in die Iterationsfunktion einzugehen. Diese Bestapproximation ist z.B. in /6/ beschrieben. Es ist dabei zu beachten, daß die Werte der Variablen betragsmäßig nicht größer als 1 werden dürfen. Das ist aber o.B.d.A. immer durch geeignete Maßeinheiten zu erreichen.

3. Beispiele

3.1 Eindimensionaler Fall

$$\text{Gegeben sei die DGL: } a * dx/dt + 4 * b * x^3 + 2 * c * x = 0 \quad (7)$$

In den folgenden Bildern ist für $a=1$, $b=0.25$ und $c=0.5$ der Wert von x zur Zeit

$t=1$ über dem Anfangswert x_0 aufgetragen. Die durch 16 analytische Iterationen erhaltene Lösungsfunktion ist jeweils in der durchgezogenen Kurve dargestellt; die gestrichelte Kurve wurde durch ein numerisches Einschrittverfahren mit der gleichen Schrittweite an 50 Stützstellen in diesem Intervall erhalten. Deutlich zu sehen sind die Abweichungen in Abb. 2a, die vom einfachen Weglassen der höheren Potenzen herrühren und die gute Übereinstimmung durch die Tschebyscheff-Approximation (Abb. 2b).

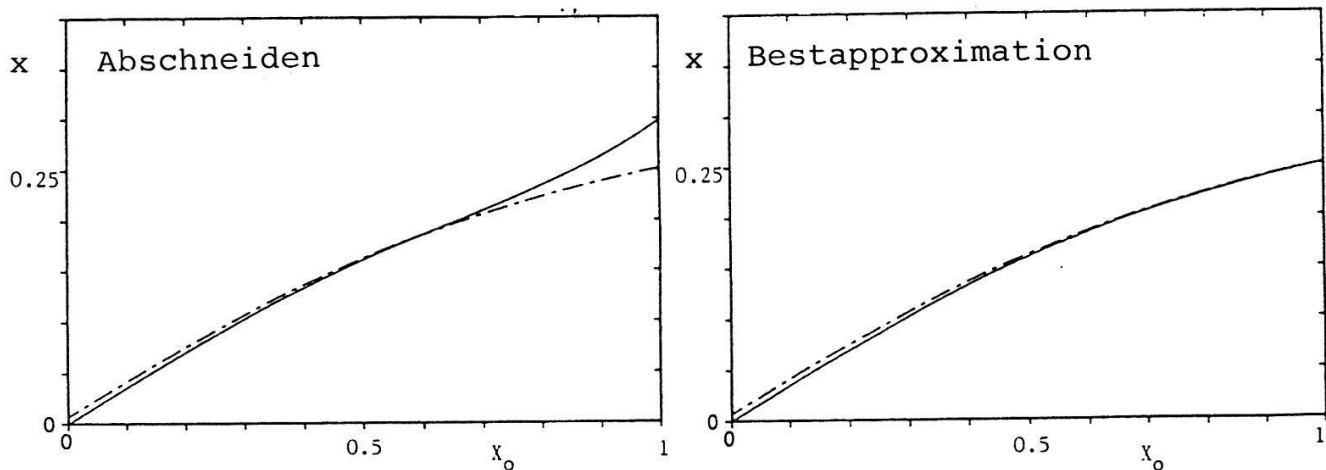


Abb. 2a,2b: Iterationsfunktionen für DGL (7) nach 16 Schritten

3.2 Mehrdimensionaler Fall

Als Beispiel für eine zweidimensionale DGL zeigen wir hier die Ergebnisse für einen speziellen nichtlinearen Schwinger, den Van-der-Pol-Oszillator. Die DGL dafür lautet: $d^2x/dt^2 + g(a-x^2)dx/dt + w^2x = 0$ (8)

Abb. 3 zeigt dazu die Phasenraumdarstellung für $w=6.28$, $g=1$ und $a=0.5$. Durch 16-fache analytische Iteration mit der Schrittweite $h=1/128$ gewinnt man folgende Iterationsfunktion, die den Oszillatorzustand zur Zeit $T=T_0+1/8$ in Abhängigkeit des Zustandes bei $T=T_0$ beschreibt.

$$x_1(T=T_0+1/8) = 0.0074594 w^2 x_0 + 0.0075925 x_0^2 v_0 + 0.1287295 v_0 \quad (9a)$$

$$x_2(T=T_0+1/8) = 0.128729 w^2 x_0 + 0.1323756 x_0^2 v_0 + 1.064356 v_0 \quad (9b)$$

Diese Formeln wurden an einer VAX 11/750 mit dem Programmsystem 'REDUCE' in einer Stunde errechnet. Vom Startpunkt ($x_0=0.1$, $v_0=0$) aus wurde mit der analytisch erhaltenen Iterationsfunktion 100 mal iteriert, und zwar für einen Zeitschritt von $1/8$. Die erhaltenen Punkte wurden mit Geradenstücken verbunden, wodurch sich die durchgezogene Linie ergab. Die gestrichelte Kurve wurde

zum Vergleich durch numerische Integration mit der Schrittweite $1/128$ erzielt. Die eigentliche Schrittweite ist damit bei beiden Verfahren gleich, weil hier eine Iteration mit der erhaltenen Iterationsfunktion bereits 16 Iterationen enthält. Außer dem Vorteil, die gleiche Genauigkeit wie die Numerik durch 16 mal weniger häufige Rechnung zu erhalten, enthält die Iterationsfunktion die drei Variablen x_0 , v_0 und w , so daß man für einen neuen Parametersatz das Verfahren nicht neu starten muß.

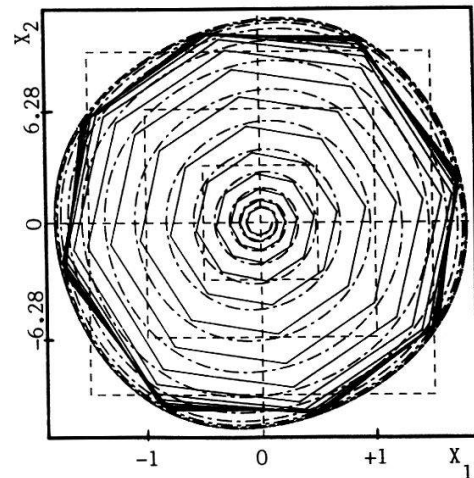


Abb.3: Phasenraumdiagramm des Van-der-Pol-Oszillators, $w=6.28$

Wir bedanken bei den Herren Doctores Wohofsky, Satzger und Hayd sowie bei den Firmen MBB und MAN. Die numerischen Simulationen für den Wobbler wurden von R. Stangl durchgeführt.

- /1/ G. Eilenberger: Nichtlineare Dynamik kondensierter Materie, Kernforschungsanlage Jülich, Jülich 1983
- /2/ Landau-Lifshitz: Lehrbuch der theoretischen Physik, Band 1, Mechanik, 6.Auflage, Berlin 1969, S. 203
- /3/ P. Collet, J.-P.-Eckmann: Iterational maps on the interval as dynamical systems, New York, 1980
- /4/ Heinz-G. Schuster: Deterministic Chaos, Weinheim 1984, Seite 93 f.
- /5/ C. Wachinger, A. Hübler, G.Reiser, E. Lüscher, H.P.A, Vol. 59, 132 (1986)
- /6/ H. Selder: Einführung in die numerische Mathematik für Ingenieure, 2. Auflage, München 1979, Seite 267 ff.

* Diese Arbeit ist Teil der Promotionsarbeit von A. Hübler.

Monte Carlo Simulation of Runaway Electrons in O_2/N_2 Mixtures

B. Eliasson and W. Egli, BBC Brown Boveri Research Center,
5405 Baden, Switzerland

Abstract: We determine through numerical simulation the critical reduced field necessary for initiation of high energy electrons in a mixture of O_2 and N_2 .

1. Introduction

We present Monte Carlo simulations of electron swarm behaviour at very high E/n values (≤ 2200 Td). We study especially the transition of the electron energy distribution function from a stationary distribution which remains the same at all times to one which leads to electrons at ever increasing energies as time increases. This transition occurs at a certain critical reduced field E_c/n . This situation is characteristic of the generation of runaway electrons in a breakdown channel at high gas pressures between two plane electrodes.

2. Theory

Some theories presented in the literature postulate that runaway electrons initiate the streamer breakdown in gases [1]. Runaway electrons are electrons which are continuously accelerated in such a way that no stationary state is reached. This process is initiated when the local reduced field is larger than some critical field E_c/n .

In this paper we describe a Monte Carlo simulation of this phenomenon. A good introduction to the subject is given in [2]. We assume a certain number N of initial electrons (10 - 500) at time $t = 0$. These electrons are accelerated under the influence of an applied field E/n . We follow the motion of these electrons in three dimensions as a function of time. We made our simulation on a VAX 8600 computer. A typical run with 500 elec-

trons and a time of 15 nsec requires approximately 16 h computer time. Because of the limited computing speed of this machine we had to make two rather restrictive assumptions:

- the electric field is constant at all times, i.e. we do not consider the eigenfield of the electrons and ions
- because of the above assumption we do not keep track of the electrons and ions created through the ionization process.

At low fields the above assumptions are valid. At higher fields it is in reality the exponential increase of the electron density and the resulting eigenfield which leads to the runaways. In our simulation runaway electrons will appear at a certain applied field. It is our belief that e.g. the determination of the critical field is not very much affected by the above assumptions.

At random intervals the electrons collide with neutral molecules. The neutral molecule can in our case either be O_2 or N_2 . If the two gases are mixed in the ratio x , i.e.

$$x = \frac{[O_2]}{[O_2] + [N_2]} = \frac{[O_2]}{n} \quad (1)$$

then we choose the type of collision partner according to the scheme:

$$\begin{aligned} R < x &\rightarrow \text{Gas 1, oxygen, } j = 1 \\ R \geq x &\rightarrow \text{Gas 2, nitrogen, } j = 2 \\ R &= \text{random number uniformly distributed} \\ &\quad \text{between } [0, 1] \end{aligned} \quad (2)$$

In a collision with a molecule the electron will either collide elastically with the molecule or excite anyone of $K-1$ possible inelastic levels. To choose which level i will be excited we proceed as follows. We define

$$\sigma_j^T = \sum_{\ell=1}^K \sigma_{j\ell} \quad j = 1, 2 \quad (3)$$

where $\sigma_{j\ell}$ is the cross section of process ℓ of the molecule j . We determine i such that

$$\sum_{\ell=1}^i \sigma_{j\ell} \geq \sigma_j^T \cdot R ; \quad \sum_{\ell=1}^{i-1} \sigma_{j\ell} < \sigma_j^T \cdot R \quad (4)$$

where the random number R is in $[0, 1]$.

Through the collision an electron of energy ε losses the energy $\Delta\varepsilon_i$ where

$$\begin{aligned} \Delta\varepsilon_1 &= 2 \frac{m}{M} (1 - \cos \psi) \varepsilon && \text{elastic} \\ \Delta\varepsilon_2 \\ &\vdots && \} \quad K-1 \text{ inelastic processes} \\ &\vdots && \\ \Delta\varepsilon_K \end{aligned} \quad (5)$$

ψ = random scattering angle

m, M = mass electron, molecule

Another important simulation parameter is the mean free path of the electron between collisions corresponding to the time of flight τ . If the collision frequency is constant, τ is distributed according to a Poisson distribution. In the general case we have

$$\int_0^{\tau} \gamma \, dt = -\ln R; \quad R \text{ in } [0, 1] \quad (6)$$

where the collision frequency γ is given by

$$\gamma = \gamma(\varepsilon) = n \cdot \sigma^T(\varepsilon) \cdot v = n \sigma^T(\varepsilon) \left(\frac{2e}{m} \varepsilon \right)^{1/2} \quad (7)$$

and

$$\sigma^T = \sigma^T(\varepsilon) = x\sigma_1^T + (1-x)\sigma_2^T \quad (8)$$

Due to the applied electric field the energy of the electron increases between collisions. If the applied field is along the z-direction the energy increase in the time interval $\Delta t = \tau$ is given by

$$\Delta\varepsilon = eE \cdot \left(\frac{1}{2} \frac{eE}{m} \Delta t^2 + v \cdot \cos\theta \cdot \Delta t \right) \quad (9)$$

where v is the velocity of the electron and $\cos\theta$ the random cosine of the velocity vector around the direction of the field.

We determine the average electron energy, $\langle\varepsilon\rangle$, the rate coefficient for process ℓ , ρ_ℓ , the transversal and longitudinal diffusion coefficients D_T and D_L , the drift velocity v_d and the energy branching of process ℓ . We have considered 14 levels in O_2 and 24 levels in N_2 .

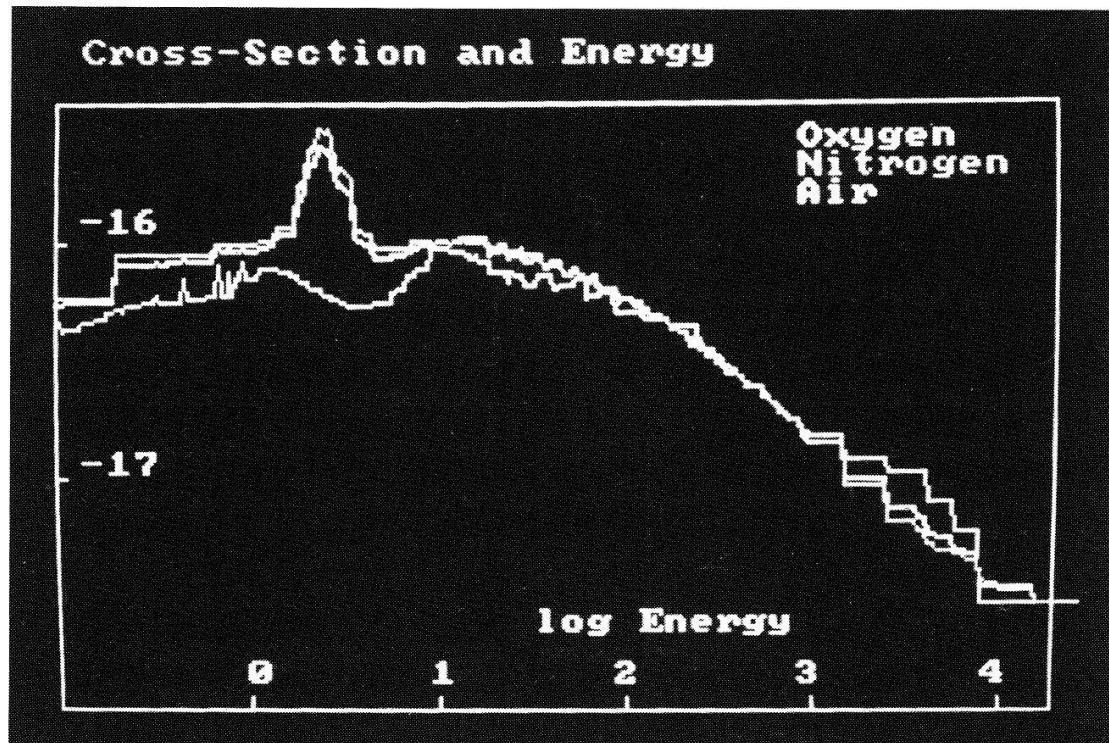


Fig. 1. Logarithmic plot of the total cross section σ^T (cm²) in oxygen ($x=1$, bottom curve), nitrogen ($x=0$) and air ($x=0.2$) vs. energy (eV).

3. Results

In Fig. 1 we show the total cross section σ^T as a function of energy in O_2 , N_2 and air. At low fields our assumption of constant field and constant number of electrons is quite good. In Fig. 2 we show a comparison of average electron energies calculated with the Monte Carlo simulation and values calculated with a Boltzmann code [3].

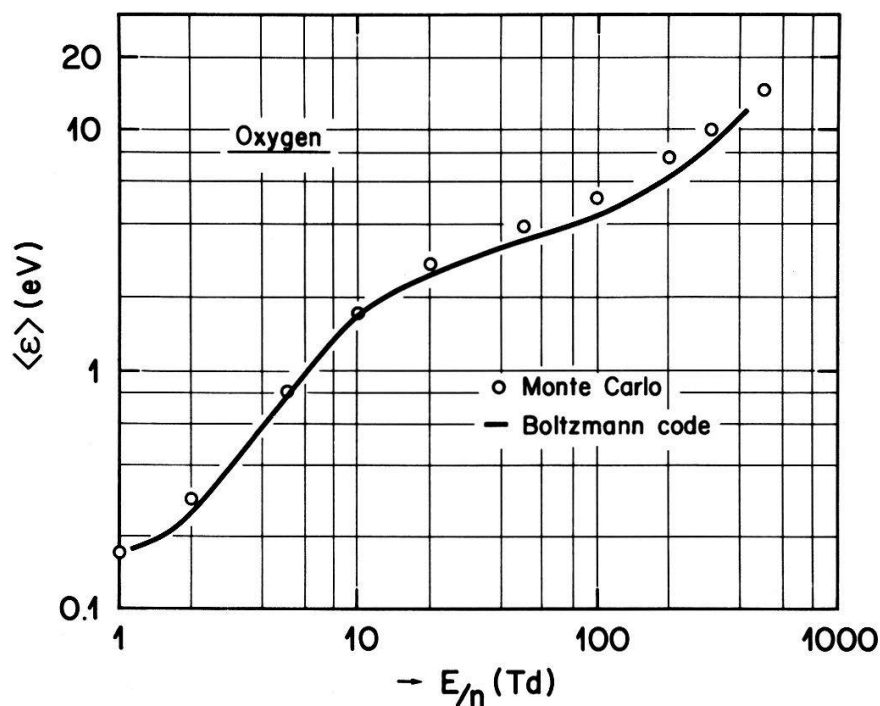


Fig. 2. Comparison of average electron energies in oxygen calculated through Monte Carlo simulation and by using a Boltzmann code.

In Fig. 3 we show the normalized total collision number in a time interval as a function of energy and time for a reduced field of 1600 Td and a field of 2000 Td. The development of electrons at high energies is evident at 2000 Td when one compares the two figures. In Fig. 4 we show the average electron

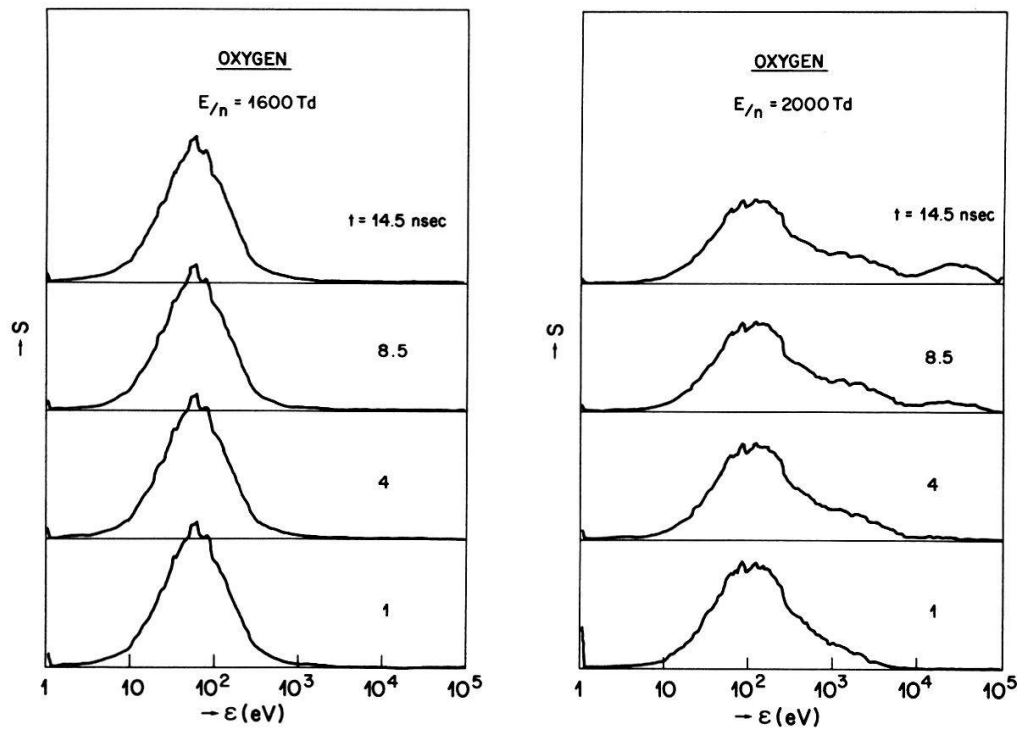


Fig. 3. Comparison of the temporal development of the normalized total number of collisions S in a time interval vs. energy in oxygen at 1600 Td and 2000 Td.

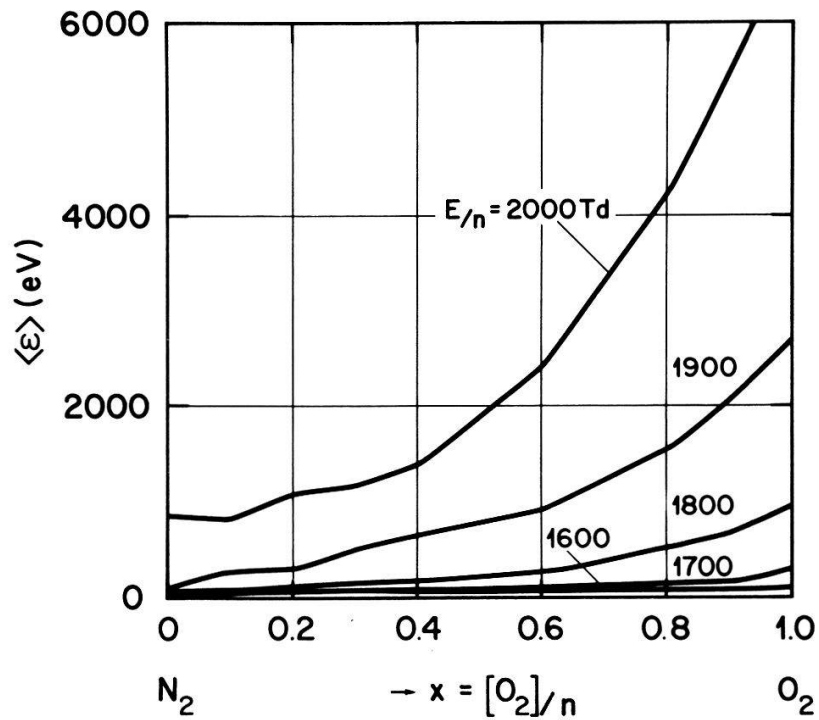


Fig. 4. Average electron energy at $t = 100$ nsec as a function of the reduced field and x .

energy as a function of x and the applied field E/n . The accelerated increase in electron energy with increasing field at E/n values above 1600 Td demonstrates that the critical field E_c/n is of this order. It is also evident that it is higher in N_2 than O_2 .

Irrespective of the assumption of isotropic scattering into all angles we see development of electrons at very high energies if the applied reduced field is higher than some critical field. According to [4] the runaway effect is more pronounced if the scattering characteristic is anisotropic. It is conceivable that in these cases the critical field could be somewhat lower than 1600 Td.

4. References

- [1] E.E. Kunhardt and W.W. Byszewski, "Development of Over-voltage Breakdown at High Gas Pressure", Phys. Rev. A, 21 (6), June 1980, 2069-77.
- [2] G.L. Braglia, "The Diffusion and Drift of Electrons in Gases. A Monte-Carlo Simulation", Physica, 92c, 1977, 91-112.
- [3] P.E. Luft, JILA Information Center Report No. 14, University of Colorado, Boulder, 1975.
- [4] E.E. Kunhardt and T. Tzeng, "Role of Electron-Molecule Angular Scattering in Shaping the Electron-Velocity Distribution", Phys. Rev. A, 34 (3), September 1986, 2158-66.

Halbleiter, dünne Schichten, Mikroelektronik II

OBSERVATION DE STRUCTURES A PUITS QUANTIQUES AlGaAs/GaAs PAR
MICROSCOPIE ELECTRONIQUE SOUS INCIDENCE RASANTE (REM)

P.A. Buffat

EPFL - I2M, Microscopie électronique, 1015 LAUSANNE

J.-D. Ganière, F.K. Reinhart

EPFL - Laboratoire d'optoélectronique - 1015 LAUSANNE

Résumé: Des interfaces de structures quantiques AlGaAs/GaAs, obtenues par croissance par jets moléculaires, ont été étudiées par microscopie électronique sous incidence rasante (REM).

1. Introduction

La microscopie électronique sous incidence rasante (REM : Reflection Electron Microscopy) est une technique intéressante pour étudier des couches épitaxiales semiconductrices, car malgré la simplicité de préparation des échantillons elle permet d'obtenir des images caractérisées par une bonne résolution latérale.

2. Instrumentation et préparation des échantillons

Nous avons utilisé pour ce travail un microscope Philips EM 430ST (300 KV).

L'échantillon étudié, une structure à puits quantiques (MQW) AlGaAs/GaAs, a été obtenu par croissance par jets moléculaires (MBE) et ses caractéristiques étaient les suivantes :

GaAs	substrat	(100)		
GaAs	800 nm			
AlGaAs	2000 nm	x = 0.35		
GaAs	3 nm			
AlGaAs	25 nm	x = 0.35		4 x
GaAs	3 nm			
GaAs	10 nm			
AlGaAs	20 nm	x = 0.35		18 x
GaAs	10 nm			
GaAs	3 nm			
AlGaAs	25 nm	x = 0.35		4 x
GaAs	3 nm			
AlGaAs	2000 nm	x = 0.35		

Par clivages successifs, on a obtenu un échantillon de $\sim 1 \times 0.8 \times 0.5 \text{ mm}^3$ que l'on a collé, avec de l'époxy, sur une grille de Cu (3 mm de diamètre).

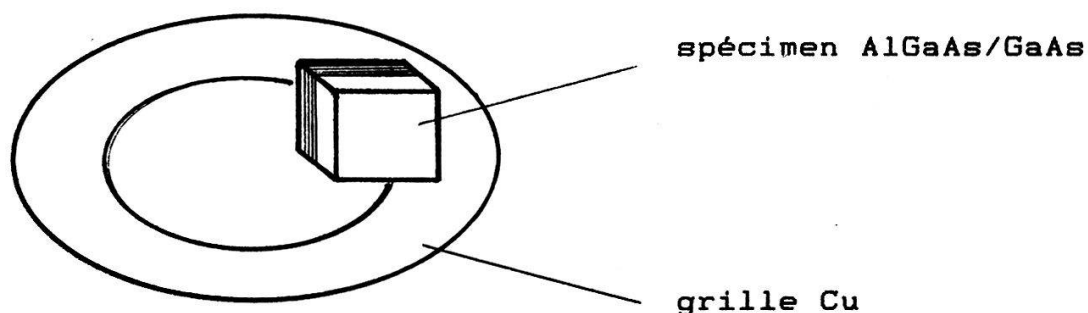


fig. 1 montage de l'échantillon

La face observée (plan de clivage (110)) n'a donc subi aucun traitement chimique.

3. Résultats

En REM le contraste est un contraste de diffraction et d'une manière générale tous les défauts qui sont associés à des champs de contraintes près de la surface peuvent être observés. L'intensité des faisceaux diffractés dépend aussi du facteur de structure des éléments considérés ⁽¹⁾. Dans notre cas on peut observer un contraste chimique lié à la présence d'Al dans certaines couches. Sur la figure 2, on peut distinguer les couches quantiques et les marches dans le plan de clivage. Il est possible d'estimer la hauteur des marches en mesurant leurs ombres portées ⁽²⁾. La ligne horizontale sombre qui coupe les MQW au bas de l'image est probablement due à la présence de dislocations vis qui émergent à la surface.

Un contraste typique de dislocations '(2)' '(3)' est présenté dans la figure 3.

La figure 4 montre que la résolution latérale est meilleure que 3 nm. On observe aussi que les interfaces ne sont pas planaires, les trois lignes (indiquées par des flèches sur la photographie) sont parfaitement perpendiculaires à la direction de croissance, ceci indique que le substrat sur lequel la croissance a été effectuée n'était pas plan (existence de marche de grande taille)(''). Il faut noter que le REM se prête bien à l'observation de ce genre de défaut, en effet le grandissement perpendiculairement et parallèlement aux couches n'étant pas le même, on peut mettre en évidence des défauts relativement importants tout en conservant une bonne résolution latérale.

4. Conclusion

Les résultats obtenus montrent que le REM est une technique intéressante pour l'étude de couches épitaxiales. Certains renseignements (par exemple, l'existence de marche sur le substrat avant le début de la croissance) ne sont que très difficilement obtenables par d'autres méthodes.

5. Références

- [1] B.C. DeCooman, Tung Hsu, K.H. Kuesters, G. Wicks, and C.B. Carter, Philos. Mag. 50, 849(1984)
- [2] Tung Hsu, S. Iijima and J.W. Cowley, Surf. Sci. 137(1984)551
- [3] N. Osokabe, Y. Tanishiro, K. Yagi, G. Honjo Surf. Sci. 102(1976)424
- [4] Tung Hsu, J. Vac. Sci. Technol. B3(4), (1985)1035

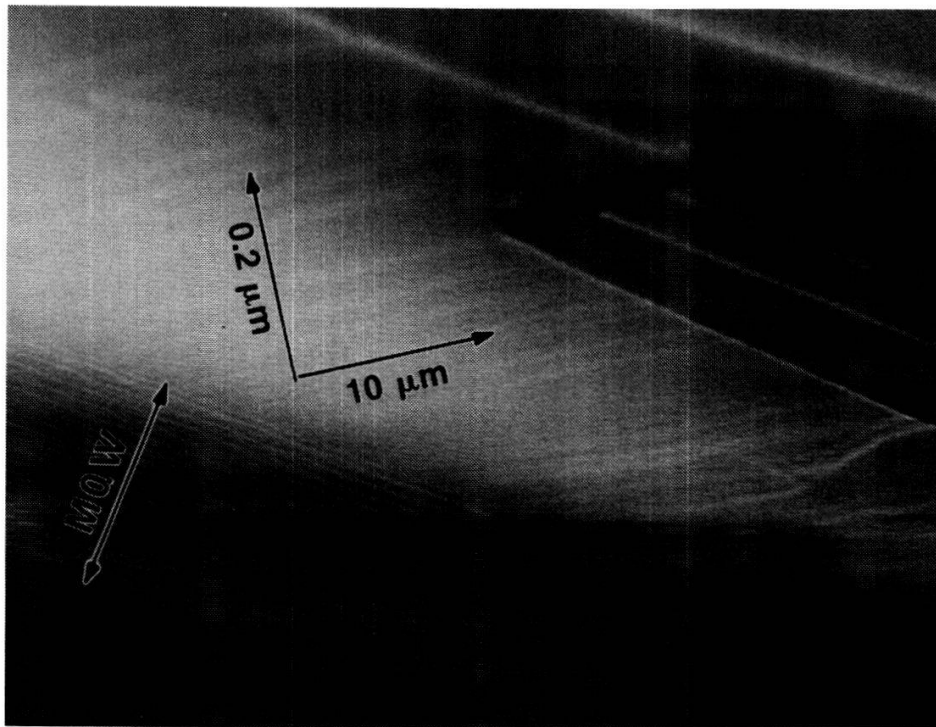


figure 2

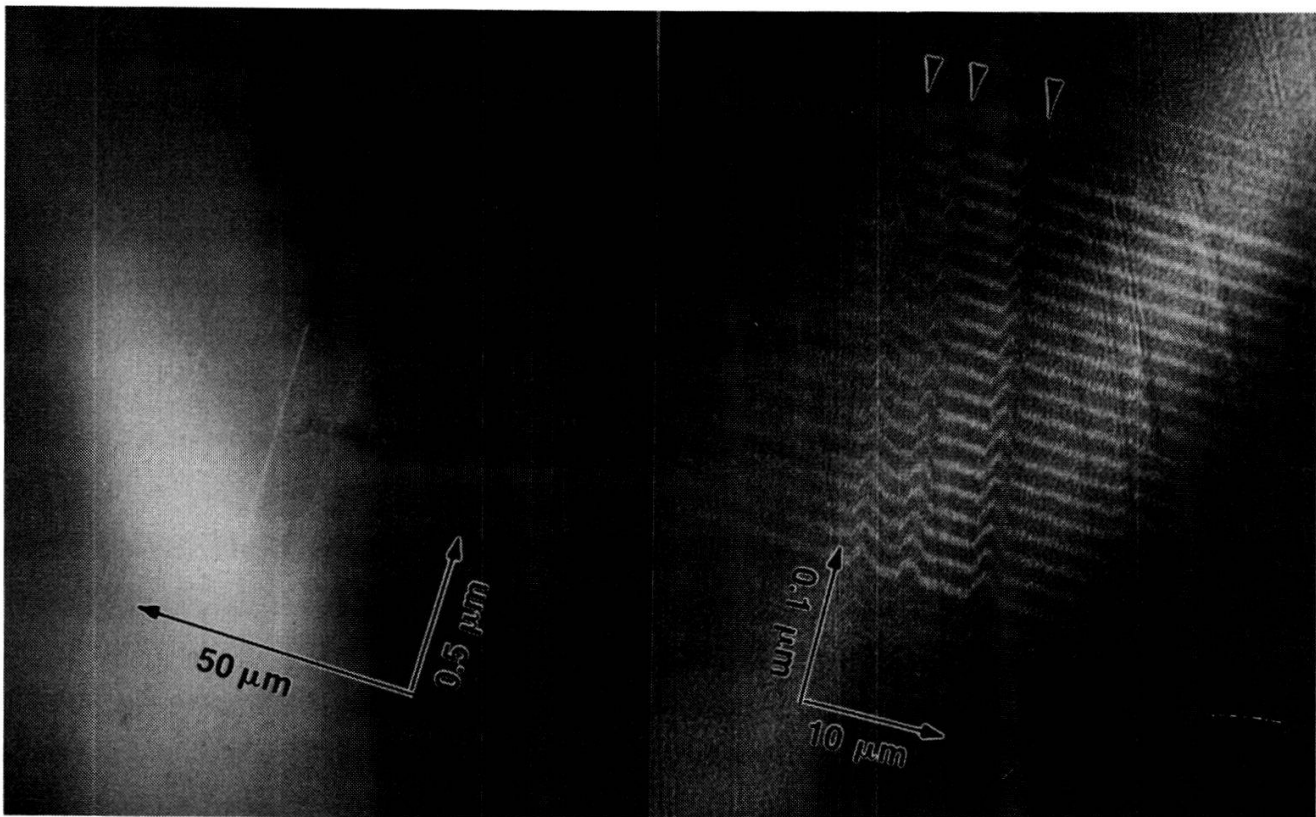


figure 3

figure 4

Advanced transmission electron microscopy in opto- and microelectronics:
State of the art, current problems and possible improvements.

P.A. Buffat,
EPFL - I2M, Microscopie Electronique, 1015 LAUSANNE.

New microscopes are characterized by a high resolving power, an efficient probe forming optics and an improved vacuum. Interfaces can be viewed edge-on either by High Resolution Electron Microscopy (HREM) down to an atomic scale or by transmission electron microscopy under grazing incidence REM (Reflection Electron Microscopy) close to 1 nanometer resolution. Current applications of these techniques at EPFL will be used to compare them in terms of information content, actual and potential performances, specimen preparation requirements and effort, and also picture interpretation problems.

High resolution electron microscopy of TiSi_2 on doped Si

E. Stocker, Inst. interdép. de microélectronique, EPFL, 1015 Lausanne

In view of its applications in Si-VLSI technology, TiSi_2 has been formed by rapid thermal annealing (1) on As-, P- and B-doped Si. The effect of the different dopants on the silicidation has been studied by high resolution electron microscopy on cross-sectional samples. Dopant implantation dose and energy were respectively: As: 10^{16} cm^{-2} , 120keV; P: $2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, 80keV; B: $4 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, 30keV. Compared to undoped Si, we found that the presence of As inhibits the silicidation and produces a highly irregular interface whereas the presence of P favors the reaction between Ti and Si and leads to a smoother interface. There is no marked difference between B-doped and undoped samples. Effects on electrical characteristics will be discussed.

(1) E. Stocker, P. Weiss, Soc. Suisse de Phys., Neuchâtel, avril 1986

*) Work sponsored by the Nat. Foundation for Scientific Research (PN 13)

Med. Strahlenphysik, Energieforschung, Atmosphäre

DIE BESTIMMUNG VON BETA-DOSEN MITTELS TL-PERSONENDOSIMETER (TLD)

R.Mini

Abt. f. med. Strahlenphysik, Inselspital, CH-3010 Bern

Zusammenfassung : Gemäss Verordnung über Anerkennung und Betrieb von Personendosimetriestellen vom 11.11.1981, muss jede Dosimetriestelle in der Lage sein, für Beta-Strahlungen mit Energien oberhalb 0,5 MeV routinemässig eine sog. Beta-Dosis zu bestimmen. Abgesehen davon, dass weder die Dosisdefinition noch die strahlenschutztechnische Interpretierbarkeit entsprechender Dosiswerte eindeutig geklärt sind, stellen sich hierbei auch messtechnische Probleme. Insbesondere hängt die Ansprechempfindlichkeit der heute in der Personendosimetrie verwendeten TLD stark von der Strahlenqualität ab, die in der Regel nicht von vornherein bekannt ist. Diese kann aber anhand von Messungen mittels verschieden gefilterten TLD abgeschätzt werden. Eine entsprechende Messprozedur wird beschrieben und erläutert.

1. Problemstellung

Die schweizerische Strahlenschutzverordnung (1) schreibt u.a. vor, dass alle beruflich strahlenexponierten Personen von einer amtlich anerkannten Messstelle dosimetrisch überwacht werden müssen. Die Anerkennung dieser Dosimetriestellen ist an bestimmte organisatorische, personelle und technische Voraussetzungen geknüpft, die in der Verordnung über Anerkennung und Betrieb von Personendosimetriestellen (2) festgehalten sind. Insbesondere geht hieraus hervor, dass jede Dosimetriestelle in der Lage sein muss, für Betastrahlungen mit Energien oberhalb 0,5 MeV routinemässig eine sog. Beta-Dosis mit einer Genauigkeit von -50% resp. +100% zu ermitteln. Dabei ist weder die Dosisgrösse noch die Messtechnik näher beschrieben. Auch ist die strahlenschutztechnische Bedeutung der Beta-Dosis, die meistens als Hautdosis interpretiert wird, weitgehend unklar. Eine entsprechende Dosisbestimmung ist zudem mit messtechnischen Schwierigkeiten verbunden, welche sich zu einem wesentlichen Teil aus den physikalischen Eigenschaften der heute in der Personendosimetrie verwendeten TLD ergeben. Wie bereits von verschiedenen Autoren (3,4) gezeigt werden konnte, braucht es für eine genaue Messung von Beta-Dosen extrem dünne TLD. Diese dürfen nur von einer sehr dünnen Schutzfolie umgeben sein. Die heute für die routinemässige Personendosimetrie eingesetzten TLD sind demgegenüber viel zu massiv. Ent-

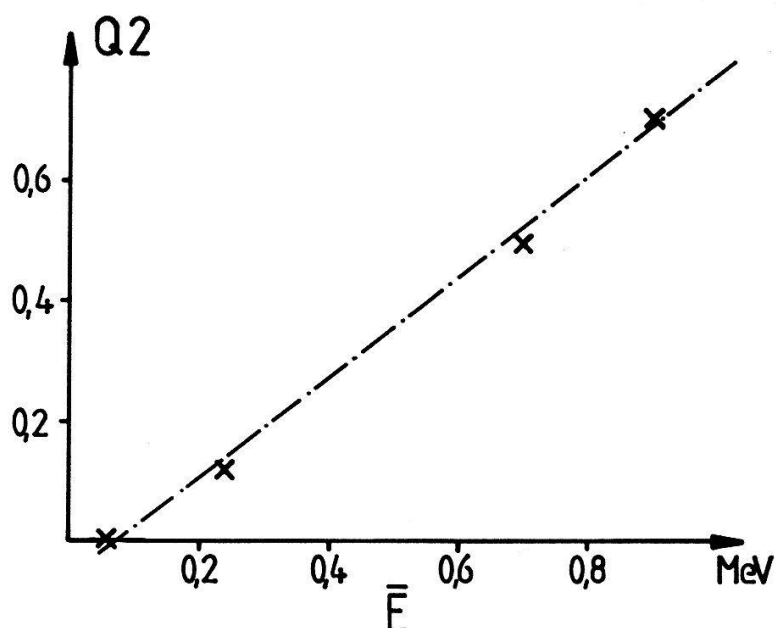
sprechend hängt deren Ansprechvermögen stark von der Strahlenenergie ab. Eine Beta-Dosismessung mit derartigen Dosimetern ist somit nur möglich, falls diese Energie einigermaßen bekannt ist.

2. Die Bestimmung der Strahlenqualität

Bei der routinemässigen Ueberwachung von beruflich strahlenexponierten Personen ist die Strahlenqualität normalerweise nicht von vornherein bekannt. In den weitaus meisten Fällen liesse sich diese durch eine Rekonstruktion der Bestrahlungsumstände ermitteln, was in der Praxis nur in Ausnahmesituationen geschieht. Die Strahlenqualität kann nämlich auch messtechnisch, anhand der resultierenden Messwerte von verschiedenen gefilterten TLD, abgeschätzt werden. Hierbei geht man von der Tatsache aus, dass die Durchdringungsfähigkeit einer bestimmten Strahlung je nach Art und Energie verschieden ist. Werden also mehrere unterschiedlich gefilterte TLD gleichzeitig bestrahlt, sind deren Messresultate von der jeweiligen Filterung abhängig, wobei die Filterwirkung der einzelnen Filter je nach Strahlenqualität differiert. Im allgemeinen nehmen die resultierenden Messwerte mit zunehmender Filterung ab. Setzt man die Messresultate in Relation zueinander, ergeben sich Verhältniszahlen, die nicht mehr von der Strahlenintensität abhängen und die für die jeweilige Strahlenqualität charakteristisch sind. Der Zusammenhang zwischen diesen Verhältniszahlen und der Qualität der Strahlungen ist je nach Filterwahl verschieden und muss für jedes Dosimetriesystem anhand von Standardbestrahlungen festgestellt werden. An unserer Abteilung wurde dies für ein TL-Dosimetriesystem der Firma Harshaw Mod. 2271/2080 durchgeführt. Als Dosismesseinheit dienten sog. Dosimeterkarten, d.h. vierfach gelochte Aluminiumplättchen, bei welchen in jeder Aussparung ein TLD in einer Teflonhülle fixiert war. Als TLD wurden die unter dem kommerziellen Namen TLD-100 bekannten LiF-Kristalle verwendet. Während den Strahlenexpositionen befanden sich diese Dosimeterkarten in speziellen Filterkassetten, wobei die vier TLD (TLD1-TLD4) zwischen vier verschiedenen Filtern (TLD1:10mg/cm²; TLD2:60 mg/cm²; TLD3:300 mg/cm²; TLD4:1000 mg/cm²) zu liegen kamen. Die Dosimeter wurden nacheinander verschiedenen Strahlungen (Röntgenstrahlungen mit Halbwertschichtdicken (HWS) von 0,04; 0,13; 0,45; 0,80; 1,3; 2,3 und 3 mmAl sowie Beta-Strahlungen mit Energien E zwischen 0.06-0.9 MeV) ausgesetzt und ausgewertet. Für jede Strahlenqualität resultierten auf diese Weise vier Messresultate, (R1-R4) aus welchen sich die von der primären Strahlenintensität unabhängigen Verhältniszahlen ($Q2=R2/R1$; $Q3=R3/R1$; $Q4=R4/R1$) bilden liessen. Zur Veranschau-

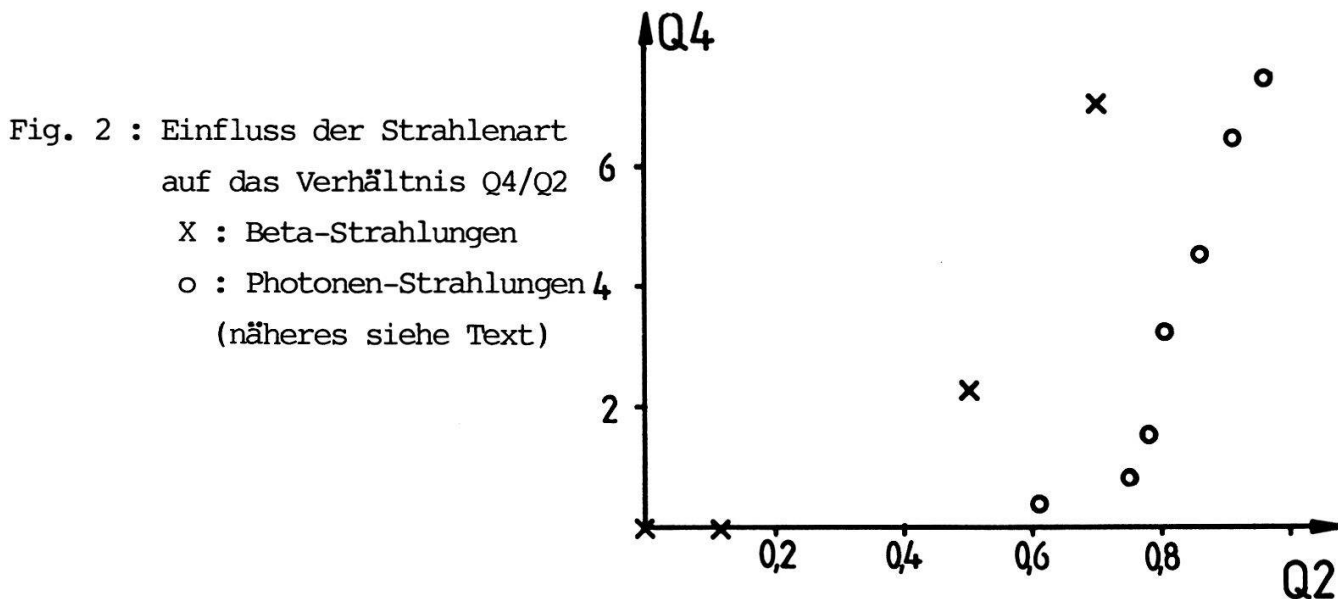
lichung sind in der Figur 1 die für vier Beta-Strahlenquellen (Pm-147; Tl-204; P-32; Y-90) ermittelten Q2-Werte in Funktion der mittleren Elektronenenergie $\bar{E}$ wiedergegeben.

Fig. 1 : Abhängigkeit der Q2-Werte von der mittl. Beta-Energie



Wie sich aus dieser Darstellung entnehmen lässt, ist der Zusammenhang zwischen den Q2-Werten und der mittleren Energie der Elektronenspektren in guter Näherung linear. Die mittlere Energie eines unbekannten Beta-Spektrums kann somit anhand des resultierenden Q2-Wertes abgeschätzt werden. Für eine automatische Beta-Dosimetrie muss aber eine erfolgte Beta-Bestrahlung vorgängig als solche identifiziert werden können. Dabei stellt deren eindeutige Unterscheidung von einer Bestrahlung mit niederenergetischen Röntgenstrahlen das hauptsächlichste Problem dar. Auch diese Aufgabe lässt sich zumindest bei homogenen Bestrahlungen anhand der festgestellten Q-Werte befriedigend lösen. Bekanntlich ist die Durchdringungsfähigkeit von Röntgenstrahlen wesentlich grösser als diejenige der Elektronen. Selbst niederenergetische Röntgenstrahlen mit Halbwertschichtdicken (HWS) unterhalb 0,05 mm Al, was einer mittleren Photonenenergie von weniger als 10 KeV entspricht, vermögen das 1000 mg/cm²-Filter zu durchdringen. Eine entsprechende Elektronenstrahlung bräuchte hierzu eine um etwa zwei Grössenordnungen grössere Energie, weshalb die resultierenden Q4-Werte für Röntgenstrahlungen im allgemeinen wesentlich grösser sind. Bei den meisten Beta-Strahlenquellen verursachen zudem bereits die dünnen Filter einen starken Empfindlichkeitsabfall was sich in kleinen Q2-Werten ausdrückt. Wie aus der Figur 2 zu entnehmen ist, lassen sich die Strahlenarten durch Korrelation dieser beiden

Q-Werte relativ gut voneinander unterscheiden.



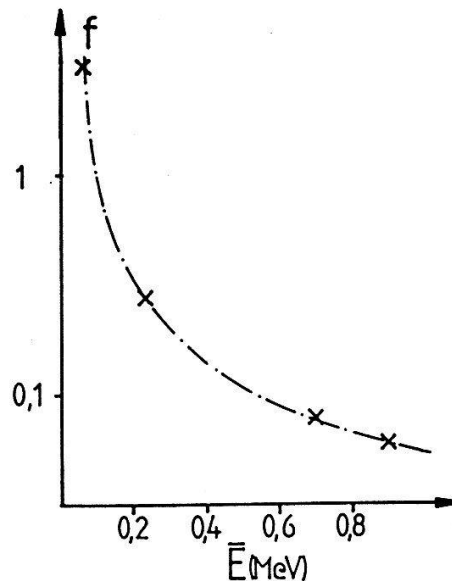
Die sehr kurzen Reichweiten der Elektronen erlauben in erster Linie eine klare Trennung zwischen niederenergetischen Elektronen- bzw. Röntgenstrahlungen. Bei Beta-Strahlenquellen mit hohen Maximalenergien macht sich zwar die in den Filtern entstehende Bremsstrahlung zunehmend bemerkbar, doch ist auch in diesem Bereich eine Unterscheidung möglich. Werden die Dosimeter gleichzeitig mit Photonen und Elektronen bestrahlt, was in medizinischen Bereichen relativ selten vorkommt, resultieren mit grosser Wahrscheinlichkeit ungewöhnliche Q-Wertkombinationen. Eine automatische Auswertung ist dann nicht mehr möglich. In diesen Fällen muss die Strahlenqualität durch eine Untersuchung der Bestrahlungsstände ermittelt werden.

3. Die Berechnung der Beta-Dosis

Naheliegenderweise wird bei der Berechnung der Beta-Dosis vom Messergebnis R_1 des am schwächsten gefilterten Dosimeters TLD1 ausgegangen. Die entsprechenden Dosisumrechnungsfaktoren, die sich auf die Dosis in einer äquivalenten Gewebetiefe von 7 mg/cm² beziehen, sind in der folgenden Figur wiedergegeben.

Wie zu erwarten war, nimmt der Umrechnungsfaktor f mit abnehmender Beta-Energie stark zu. Währenddem dieser für die Quellen Y-90, P-32 und Tl-204 noch von der gleichen Grössenordnung ist, resultiert für Pm-147 ein mindestens zehn mal grösserer Wert. Dies dokumentiert eindrücklich, wie kritisch eine Beta-Dosisbestimmung im Falle niederenergetischer Elektronen ist. Eine routinemässige Dosimetrie ist in diesem Bereich nicht mehr sinnvoll.

Fig. 3 : Kalibrierfaktoren f in
Funktion der mittleren
Beta-Energie



4. Schlussfolgerungen

Bei der Bestimmung von Beta-Dosen sieht man sich mit einer Vielzahl von Problemen konfrontiert. Diese reichen von der Definition der Messgrösse zur Kalibrierung der Messsysteme bis hin zur strahlenschutzgerechten Interpretation der resultierenden Dosiswerte. In der vorliegenden Arbeit wurden ausschliesslich die messtechnischen Konsequenzen untersucht. Eine automatische Beta-Dosimetrie, wie sie in der Dosimetrieverordnung vorgeschrieben ist, lässt sich mit den heutigen TL-Dosimetriesystemen nur realisieren, falls es gelingt, die Strahlenqualität messtechnisch zu bestimmen. Wie gezeigt werden konnte, ist dies bei gleichzeitiger Messung mittels vier verschiedenen gefilterten Dosimetern grundsätzlich möglich. Resultieren dabei aber strahlenschutztechnisch relevante Dosen, sollten diese in jedem Fall wegen der vielen verbleibenden Unsicherheitsfaktoren durch zusätzliche Abschätzungen verifiziert werden.

5. Literatur

- (1) Verordnung über den Strahlenschutz vom 30.6.1976, EDMZ 1976
- (2) Verordnung über Anerkennung und Betrieb von Dosimetriestellen, EDMZ 1981
- (3) D.F.Regulla und L.Caldas, Fachverb.f.Strahlenschutz, FS 79-19-AKD, 1979
- (4) J.Böhm et al., GSF Bericht ISSN 0721-1694, 141, 1982

6. Verdankungen

Mein Dank gilt vor allem der Firma PEDOS AG, die mir nicht nur Ihre Daten zur Verfügung stellte, sondern auch beim Abklären vieler Detailfragen behilflich war. Im weiteren danke ich Fr. A. Giger für die Ausführung der Schreibarbeiten.

DIE ERMITTLUNG DER GANZKOERPERDOSIS ANHAND VON THERMOLUMINESZENZMESSUNGEN

R.Mini

Abt. f. med. Strahlenphysik, Inselspital, CH-3010 BERN

Zusammenfassung : Von den amtlich anerkannten Personendosimetriestellen arbeiten mehr als die Hälfte mit Thermolumineszenzdosimetern (TLD). Die resultierenden Messergebnisse dienen dabei als Ausgangswerte für die Bestimmung von sog. Ganzkörperdosen. In der Praxis werden hierzu sehr unterschiedliche Berechnungsmethoden angewandt. In der vorliegenden Arbeit ist eine Methode beschrieben, die eine Dosisbestimmung mittels verschieden gefilterten TLD erlaubt.

1. Ausgangslage

In der Schweiz werden zur Zeit etwa fünfzigtausend beruflich strahlenexponierte Personen dosimetrisch überwacht. Bis in die jüngere Vergangenheit erfolgte diese Ueberwachung fast ausschliesslich mittels Filmdosimetern. Erst die Fortschritte, die in den letzten Jahren auf dem Gebiete der automatischen TL-Dosimetrie erzielt wurden, bewirkten in der Personendosimetrie einen eigentlichen Umschwung. Viele Dosimetriestellen wechselten die Messtechnik, so dass heute in unserem Lande bereits über 80% aller beruflich strahlenexponierten Personen anhand von Thermolumineszenzdosimetern (TLD) überwacht werden. Die dosimetrische Zielsetzung dieser Ueberwachung ist die Bestimmung der Ganzkörperdosis. Definitionsgemäss ist dies diejenige Dosis, welche sich nach einer unbeabsichtigten, beruflich bedingten Strahlenexposition am Körperstamm der betroffenen Person in einer äquivalenten Weichteiltiefe von 1000 mg/cm² ergibt. Diese Dosis dient schliesslich als Referenzmass für die Abschätzung des beruflich bedingten Strahlenrisikos. Aus naheliegenden Gründen kann die Ganzkörperdosis nicht direkt, in Situ gemessen werden. Man ist zu deren Bestimmung auf indirekte Methoden angewiesen.

2. Die Bestimmung einer Dosimeterdosis

Das Ergebnis einer Auswertung eines TLD ist bekanntlich nicht nur von der Intensität der Strahlenwirkung, sondern auch von den physikalisch-chemischen Eigenschaften des Dosimeters und von der Nachweisempfindlichkeit der Auswerteprozedur bzw. der Messapparatur abhängig. Bei der Umrechnung der TL-Messergebnisse in die entsprechenden Dosen müssen all diese Einflüsse möglichst genau bekannt sein. Da die Stabilität der Nachweisempfindlichkeit einer Messapparatur anhand von verschiedenen Kontrollmessungen, wie beispielsweise Leer-

wert- oder Referenzlichtmessungen, überprüft und bei Bedarf durch elektronische Nachregulierungen auch weitgehend korrigiert werden kann, wird bei der Dosisberechnung von einer konstanten Nachweisempfindlichkeit ausgegangen. Im Gegensatz hierzu lässt sich die Ansprechwahrscheinlichkeit der einzelnen TLD nicht auf kontrollierbare Weise verändern. Zu einem wesentlichen Teil ist diese durch die herstellungsbedingten Eigenschaften der Dosimeter gegeben und hängt zudem von der individuellen thermischen und dosimetrischen Vorgeschichte ab. Schliesslich hat jedes TL-Material seine eigene Ansprechcharakteristik, die mehr oder weniger stark von der Strahlenqualität abhängig ist. Die Berücksichtigung all dieser Einflüsse setzt praktisch voraus, dass jedes TLD einzeln geeicht werden sollte, was für eine Dosimetriestelle mit mehreren tausend Dosimetern einen grossen Arbeitsaufwand darstellt. Dies umsomehr, als diese Eichung in regelmässigen Zeitabständen wiederholt werden sollte. In der Praxis wird aber davon ausgegangen, dass die von Dosimeter zu Dosimeter beobachtbaren Empfindlichkeitsunterschiede nicht von der Strahlung abhängig seien und daher mit einer einzigen Standardbestrahlung festgestellt werden können. Derartige Bestrahlungen lassen sich bei modernen Dosimetriegeräten automatisch durchführen. Jedem TLD kann dann auf diese Weise ein sog. Empfindlichkeitsfaktor E zugeordnet werden. Die für alle Dosimeter des gleichen Typs geltende Abhängigkeit k der TL-Ausbeute von der Strahlenqualität lässt sich dann unabhängig hiervon durch eine Vielzahl von Kalibrierungsbestrahlungen bestimmen. Diese arbeits- und messtechnisch aufwendige Arbeit muss dabei nur ein mal gemacht werden. Zur Veranschaulichung sind in der ersten Figur die normierten Ansprechempfindlichkeiten für verschiedene TL-Materialien in Abhängigkeit von der Photonenenergie wiedergegeben.

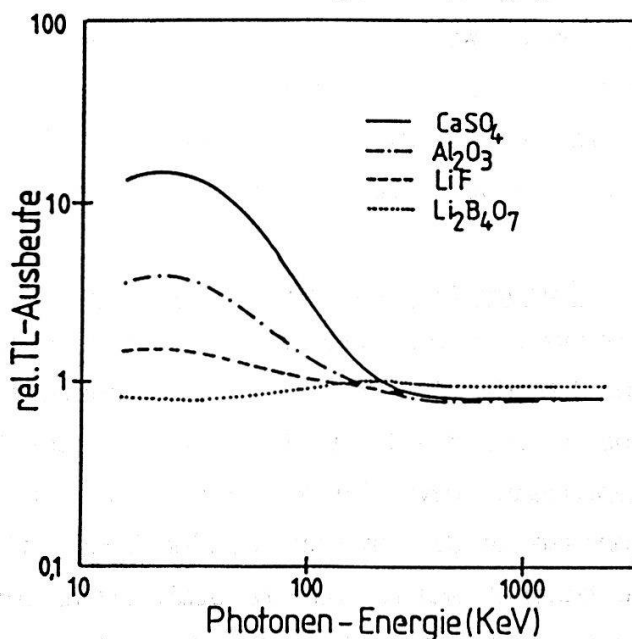


Fig. 1 : Empfindlichkeit k verschiedener TL-Materialien in Abhängigkeit von der mittl. Photonenenergie

Mit diesen Angaben ist es nun möglich für jedes festgestellte TL-Messergebnis X die entsprechende Dosimeterdosis D(TLD) zu berechnen:

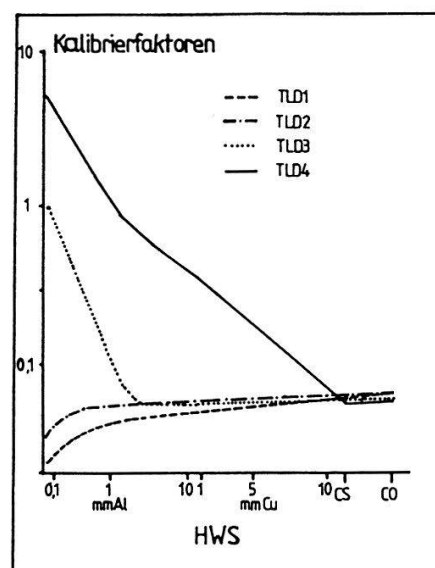
$$D(\text{TLD}) = (k * X) / E$$

wobei X das TL-Messergebnis, E der Empfindlichkeitsfaktor des verwendeten Dosimeters und k der von der Strahlenqualität abhängige Kalibrierfaktor ist.

3. Die Ermittlung der Ganzkörperdosis

Wie bereits erwähnt, bezieht sich die Ganzkörperdosis definitionsgemäss auf eine äquivalente Weichteiltiefe von 1000 mg/cm². Die im vorangegangenen Abschnitt bestimmte Dosimeterdosis ist aber nur für die Tiefe des Dosimetermesspunktes gültig. Wegen der endlichen Ausdehnung des Dosimeters ist dieser Messpunkt von der Dosimetergrösse, der Dosimeterfilterung und von der Strahlenqualität abhängig. Bei einer Umrechnung dieser Dosis muss zudem berücksichtigt werden, dass die atomare Zusammensetzung der Dosimeter und der umhüllenden Filter nicht derjenigen von Weichteilgeweben entspricht. Auch in diesem Fall ist eine experimentelle Bestimmung von Umrechnungsfaktoren der einfachste Lösungsweg. Die Dosimeter werden hierzu auf einen gewebeäquivalenten Plexiglasblock montiert und bestrahlt. Gleichzeitig mit den TLD wird auch eine geeichte Ionisationskammer mitbestrahlt, die sich dank einer speziellen Bohrung in einer Tiefe von 1000 mg/cm² befindet. Das Verhältnis zwischen der ionometrisch im Phantom gemessenen Ganzkörperdosis D(GKD) und der anhand der TLD ermittelten Dosimeterdosis D(TLD) entspricht dann dem gesuchten Umrechnungsfaktor u. Solche Messungen wurden im

Fig. 2 : Umrechnungsfaktoren für vier verschieden gefilterte LiF-Personendosimeter in Abhängigkeit von der Strahlenqualität (näheres siehe Text)



Aufträge einer schweizerischen Personendosimetriestelle an unsere Abteilung für LiF-Dosimeter durchgeführt. In der Figur 2 sind die entsprechenden Faktoren für vier verschiedene Filterungen (TLD1-4: Folienfenster; 60 mg/cm²; 300 mg/cm² und 1000 mg/cm²) in Abhängigkeit von der Halbwertschichtdicke (HWS) der verwendeten Strahlung wiedergegeben. Damit lässt sich die Ganzkörperdosis bei bekannter Strahlenqualität aus

$$D(\text{GKD}) = u * D(\text{TLD}) = k * u * X / E$$

berechnen. Da die Faktoren k und u für ein bestimmtes TL-Material nur von der Strahlenqualität abhängig sind, werden diese in der Routine zu einem einzigen Kalibrierfaktor $f = k * u$ zusammengefasst.

4. Schlussfolgerungen

Bei der Umrechnung von TL-Messwerten in sog. Ganzkörperdosen sind viele verschiedene Einflüsse zu berücksichtigen, die im Einzelnen kaum zu erfassen sind. Durch eine geschickte Zusammenfassung lässt sich erreichen, dass für die Routine nur noch zwei Umrechnungsgrößen erheblich sind, die beide experimentell bestimmt werden können. Der Empfindlichkeitsfaktor E berücksichtigt dabei die spezifischen Dosimeteigenschaften, während alle anderen Einflussgrößen im Kalibrierfaktor f zusammengefasst sind. Im Gegensatz zum Empfindlichkeitsfaktor E braucht der Kalibrierfaktor f für ein bestimmtes Dosimetriegerät nur einmal gemessen zu werden, was für die Dosimetriestellen eine wesentliche Arbeitersparnis darstellt.

5. Verdankungen

Mein Dank gilt in erster Linie der Firma PEDOS AG, die mich bei meinen Messarbeiten tatkräftig unterstützte. Im weiteren danke ich Fr. A. Giger für die Ausführung der Schreibarbeiten.

Schweizerische Empfehlungen für die Dosimetrie hochenergetischer Photonen- und Elektronenstrahlen

L.André^{*}), A.v.Arxx, I.Cord, G. Garavaglia (Vorsitzender)⁺), F. Jonescu, J.F. Valley, Arbeitsgruppe der Schweizerischen Gesellschaft für Strahlenbiologie und Strahlenphysik.

Die absolute Dosimetrie an medizinischen Beschleunigungsanlagen basiert auf Messungen mit zylindrischen Ionisationskammern. Diese Kammern werden in Standard-Laboratorien mit einer Aufbaukappe im Strahl einer Kobaltquelle ($\bar{E}$ = 1.25 MeV) in Luft geeicht. Die Arbeitsgruppe hat Empfehlungen ausgearbeitet, wie man die absorbierte Dosis in Wasser in einem Referenzpunkt des Bestrahlungsfeldes misst und mit der Eichung die Energiedosis für Strahlenenergien bis 50 MeV bestimmt.

^{*})Abt. f. med. Strahlenphysik, Universität Bern, 3010 Bern

⁺)Ospedale San Giovanni, 6500 Bellinzona

Uebersicht über die Strahlenbelastung des Atemapparates durch Inhalation von natürlichen Radionukliden.

G. Poretti

Abteilung für Medizinische Strahlenphysik, Inselspital, Universität Bern

Während der letzten zwanzig Jahren haben die Arbeiten über die Strahlenbelastung der Atmungsorgane durch die inhalierten natürlichen Nukliden Radon, Thoron und Folgeprodukte an Bedeutung zugenommen, weil die im respiratorischen Trakt, hauptsächlich durch die Wirkungen der α -Strahlen entstehenden Dosen, auch bei der allgemeinen Bevölkerung Werte erreichen, die vergleichbar oder sogar höher sind als die mittleren Expositionen einer Population durch röntgendiagnostische Untersuchungen.

Mit dieser Uebersicht wird versucht, die wichtigsten Ueberlegungen kurz zusammenzufassen, die zur Bestimmung und Interpretation der erwähnten Strahlen führen.

Messung von integralen Daten für fortgeschrittene Druckwasserreaktoren

R.Seiler, R.Chawla, K.Gmür, H.Hager, G.Piller

Eidg. Institut für Reaktorforschung, 5303 Würenlingen

Seit einigen Jahren wird am PROTEUS-Reaktor die Neutronenphysik des fortgeschrittenen Druckwasserreaktors untersucht. Dieser hochkonvertierende Leichtwasserreaktor ist charakterisiert durch sein enges Brennstoffstab-Gitter in hexagonaler Anordnung mit PuO_2/UO_2 -Brennstoff. Bei verschiedenen Pu-Anreicherungen und Moderatorzuständen wurden zentrale Reaktionsraten und Reaktionsraten-Verteilungen gemessen (Spaltung von ^{235}U , ^{238}U , ^{239}Pu und ^{241}Pu , Einfang in ^{238}U und ^{242}Pu), womit sich k_{∞} und seine Komponenten bestimmen lassen. Die Messung von k_{∞} als Funktion der Moderatordichte ergibt den k_{∞} -Voidkoeffizienten, der ein wichtiger Sicherheitsparameter ist. Die Messwerte werden mit berechneten Werten verglichen.

PHYSIK DER KONDENSIERTEN MATERIE
Oberflächen, Grenzflächen

ELECTROREFLECTANCE AT THE BiI_3 /ELECTROLYTE INTERFACE

O.E. Hüsser, F. Hulliger and H. von Känel, Laboratorium für Festkörperphysik,
ETH Zürich, CH-8093 Zürich, Switzerland

Electrolyte electroreflectance (EER) is a powerful technique for studying important properties of the semiconductor/electrolyte interface such as the flat-band potential and the density and distribution of surface states. EER is, however, usually restricted to semiconductors (metals), the required electrical field strength being present in the space charge (Helmholtz) layer(s), respectively. We report now about EER measurements on high-resistivity BiI_3 electrodes whereby the space charge and the resulting electrical field is generated optically, i.e. by background irradiation.

In insulators and high-resistivity semiconductors, the photocurrent response is usually limited to a narrow spectral region near the absorption edge. Electron-hole pairs created by suprabandgap radiation build up an internal electrical field opposite to the external one, thus preventing an efficient separation of the former. It has been shown for a large number of different materials that suitable background irradiation changes drastically the properties of the insulator/electrolyte interface [1 - 3]. As a result, the photosensitivity can be enhanced over the whole spectral range and photocurrent vs. potential curves which depend linearly on the potential under normal experimental conditions change to much steeper IV-curves, saturating within a few volts.

We have now, for the first time, been able to observe an EER signal at a high-resistivity BiI_3 electrode due to an optically generated space-charge layer. BiI_3 has a resistivity of about $10^6 \, \Omega\text{cm}$ at room temperature and its crystal symmetry is rhombohedral. Fig. 1 shows the dependence of the EER signal on the background light intensity as a function of photon energy. The electrode potential was 5 volt vs. SCE (saturated Calomel electrode). In order to get a suitable signal, a modulation amplitude of 2 volt peak to peak was chosen at a frequency of 40 Hz. The various intensities of the background irradiation correspond to 1.0, 0.50, 0.20 and 0.05 (given in arbitrary units). Without the background illumination no EER signal could be detected under any circumstances. From the

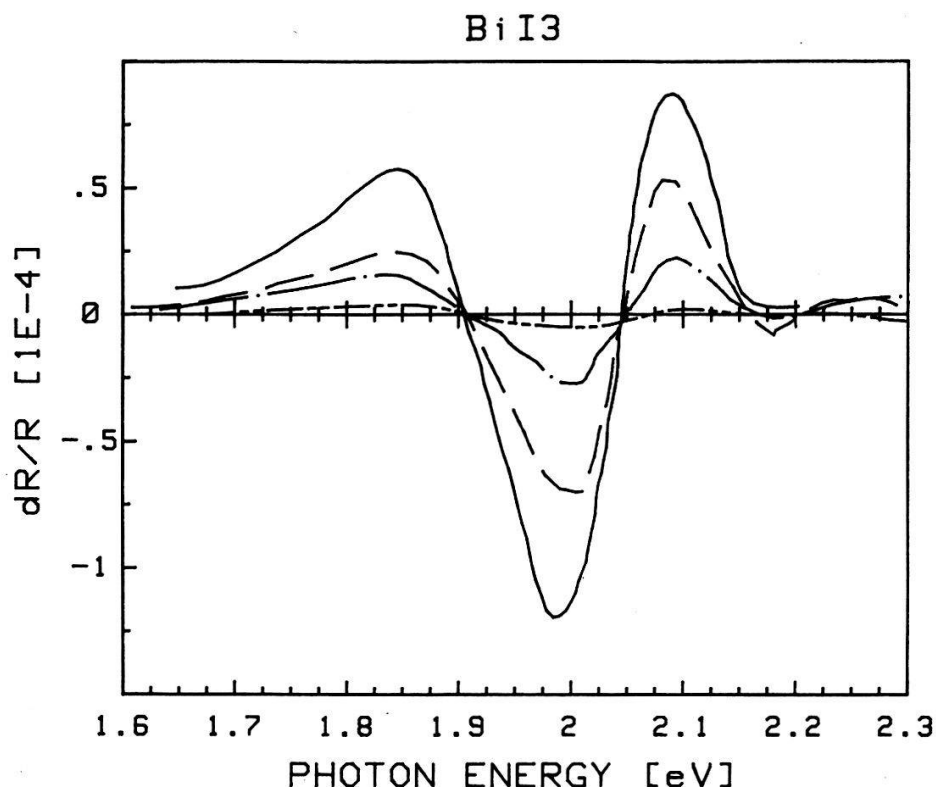


Fig. 1: EER spectrum of a BiI_3 electrode in $1\text{M H}_2\text{SO}_4$ for various intensities of the background illumination ($E_{\text{back}} = 1.19$ eV, intensities (given in arbitrary units): 1.0, 0.50, 0.20, 0.05, resp.). Electrode potential 5 V_{sce} , modulation 2 volt peak to peak, frequency 40 Hz.

lineshape of the EER signal it is possible to determine the direct energy gap, E_{gap} , within few meV. Thereby a "three-point method" or a non-linear least-square fit to the lineshape is used [4]. In the low-field limit, the EER signal can be described by the following formula:

$$\frac{dR}{R} \sim \text{Re}\{ A \Gamma^{-n} e^{i\theta} (E - E_{\text{gap}} + i\Gamma)^{-n} \} . \quad (1)$$

Formula (1) depends on five parameters: the amplitude A , phase projection factor θ , energy gap E_{gap} , broadening parameter Γ , and exponent n . As a mean value from the two methods - "three-point method" and non-linear least-square fit to formula (1) - we obtain $E_{\text{gap}} = 2.010 \pm 0.01$ eV for BiI_3 .

The physical mechanism responsible for the formation of a space-charge region is the following: Suitable background illumination is weakly absorbed by the insulator ($\rightarrow$ "subbandgap illumination") and produces charge carriers throughout the bulk of the sample by either of two processes. In the case of near-bandgap illumination electron-hole pairs are created by interband absorption. The carriers which are predominantly trapped then produce the fixed charges of the space-charge region. Alternatively, direct excitation of impurity levels in the gap can lead to the same result. In either case, the insulator is transformed into an effective n- or p-type semiconductor with a carrier concentration depending on the intensity of the background irradiation.

The feasibility of EER signal measurements at the insulator/electrolyte interface for low electrode potentials using suitable background illumination confirms clearly the model given above. Moreover, EER in conjunction with previously used methods (photocurrent spectra, etc.) allows the photoelectrochemical characterization of potential solar cell materials before the time-consuming process of chemical doping has to be undertaken [2, 5].

Acknowledgement

Many valuable discussions with T. Cotting and the financial support by the Federal Office for Education and Science are gratefully acknowledged.

References

- [1] H. von Känel, E. Kaldis, P. Wachter, H. Gerischer, J. Electrochem. Soc., 131, 77 (1984).
- [2] O.E. Hüsser, H. von Känel, F. Lévy, J. Electrochem. Soc., 132, 810 (1985).
- [3] O.E. Hüsser, H. von Känel, F. Hulliger, H.P.A., 57, 767 (1984).
- [4] D.E. Aspnes, Handbook on Semiconductors, ed. by M. Balkanski, North-Holland Publishing Company (1980).
- [5] O.E. Hüsser, F. Hulliger, H. von Känel, submitted to J. Electrochem. Soc. (1986).

Scanning Tunneling Microscopy of Metallic Glasses and Graphite

R. Wiesendanger, M. Ringger, L. Rosenthaler, H.R. Hidber,
P. Oelhafen, H. Rudin, and H.-J. Güntherodt

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

We have performed high resolution STM measurements of the topography of glassy $\text{Rh}_{25}\text{Zr}_{75}$ alloys in the constant current mode as well as measurements of changes in the local potential barrier height of the tip-vacuum-sample junction using the vibrating tip technique in order to get informations of the chemical surface structure.

We have studied the surface of highly oriented pyrolytic graphite (HOPG) by STM. On an atomic scale the hexagonal symmetry of the graphite lattice has been seen indicating a high lateral resolution of a few Å of our STM.

EELFS-Untersuchungen der Oxidation von Eisen

Ph. Aebi, M. Erbudak, F. Hulliger¹, G. Kostorz, F. Vanini
Institut für Angewandte Physik, ETH-Hönggerberg, 8093 Zürich
¹Lab.f.Festkörperphysik, ETH-Hönggerberg, 8093 Zürich

Die Sauerstoffadsorption auf polykristallinem Eisen wurde mit EELFS (Extended Electron Energy Loss Fine Structure) untersucht. Die Spektren zeigen eine empfindliche Abhängigkeit der Oxidation von der Qualität der Oberfläche. Details der Auswertung zur Bestimmung interatomarer Bindungsabstände werden diskutiert. Die Ergebnisse werden mit bekannten Abständen in verschiedenen Eisen-Sauerstoff-Verbindungen verglichen.

Elektronische Uebergänge in Uebergangsmetallen

A. Cornaz, Ph. Aebi, M. Erbudak, F. Stucki, F. Vanini
Institut für Angewandte Physik, ETH-Hönggerberg, 8093 Zürich

Die np-nd Uebergänge in V(n=3), Nb(n=4) und Ta(n=5) wurden mit Elektronenenergieverlustspektroskopie untersucht. Sie zeigen in V und Nb einen atomaren Charakter; die Spektren können mit im Potentialfeld des $3p^5$ -Lochs aufgespaltenen und durch den Fano-Effekt verbreiterten Multipletts des angeregten d^{N+1} -Endzustands interpretiert werden. In Ta überwiegt die Spin-Bahn-Wechselwirkung. Die Messergebnisse werden mit der Zustandsdichte des unbesetzten 5d-Bands in Zusammenhang gebracht und mit BIS-Messungen verglichen.

MAGNETISCHES VERHALTEN DUENNER FILME AUF FERROMAGNETEN

A.Stuck, M.Taborelli, R.Allenspach*, M.Landolt

Laboratorium für Festkörperphysik, ETH Hönggerberg, 8093 Zürich

Die spinpolarisierte Augerelektronenspektroskopie gibt element-spezifisch Aufschluss über das magnetische Verhalten von Oberflächen. Sie eignet sich somit zur Untersuchung der magnetischen Wechselwirkung von dünnen Filmen auf Ferromagneten.

Als Beispiele dieser Methode werden Gd auf Fe(100) und Cr auf Fe(100) diskutiert. Wir finden, dass das Gd antiparallel an Fe koppelt und erhalten eine oberflächenspezifische Temperatur-abhängigkeit der Gd und Fe Untergitter. Entgegen theoretischen Voraussagen bildet Cr bei Zimmertemperatur keine ferromagnetische Monoschicht auf Fe(100) aus.

*dauernde Adresse: IBM Forsch.lab., Säumerstr.4, 8803 Rüschlikon

Halbleiter

Calcul de la densité électronique
dans le gaz bidimensionnel des transistors TEGFET

B. Zimmermann, J.F. Palmier *, M. Py, M. Ilegems
IIME, EPFL, CH-1015 Lausanne
*Centre National d'Etudes en Télécommunications,
196 ave. Ravera, F-92220 Bagneux

Nous présentons différentes approches pour calculer la densité des électrons dans le gaz bidimensionnel des transistors TEGFET (Two-dimensional Electron Gas Field Effect Transistor). La connaissance de cette densité est importante pour calculer les caractéristiques électriques du transistor. Dans la section I, nous rappelons la structure d'un TEGFET en GaAs. Dans la section II, nous exposons une approche semi-classique et une approche dite "quantique" pour calculer la densité d'électrons dans le gaz bidimensionnel. Dans la section III, nous présentons des méthodes pour résoudre les équations données par chacune des deux approches. Dans la section IV, nous montrons des résultats et les discuterons dans la section V.

I. Description du TEGFET

La figure 1 montre un TEGFET en GaAs. Sa structure en couches est telle qu'une accumulation d'électrons, nommée "gaz bidimensionnel d'électrons", se produit à l'interface des couches 1 et 2. La couche 2 sépare ces électrons des impuretés ionisées dans la couche 3. Ainsi leur mobilité est très élevée. La densité d'électrons dans le gaz bidimensionnel dépend de paramètres structuraux comme l'épaisseur et le dopage des couches, et peut être modulée par la tension appliquée entre grille et substrat.

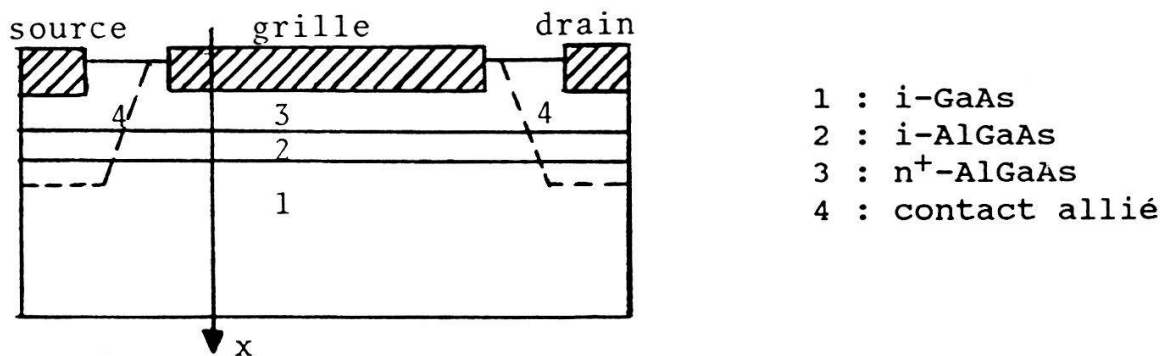


figure 1

II. Approches semi-classique et quantique

Le puits étroit formé dans la bande de conduction à l'interface des couches 1 et 2 cause une quantification de l'énergie associée au mouvement dans la direction perpendiculaire aux interfaces. Dans une approche semi-classique du calcul de la densité électronique, cette quantification est négligée, alors qu'elle est prise en compte dans une approche quantique. La forme du bas de la bande de conduction $E_c(x)$ et la position du niveau de Fermi E_f dans un TEGFET autour de l'interface des couches 1 et 2 sont montrées sur la figure 2.

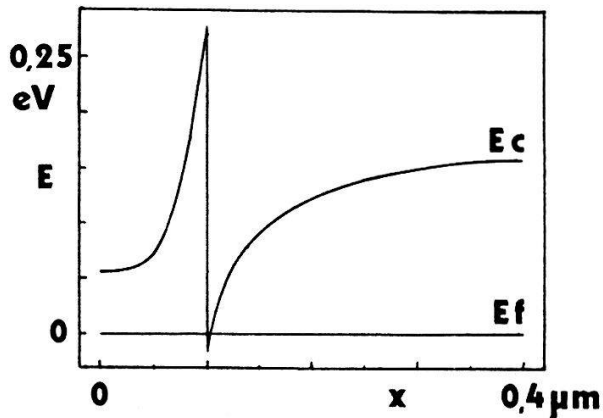


figure 2

La densité d'électrons $n(x)$ s'écrit

- dans l'approche semi-classique :
$$n(x) = \int_{E_c(x)}^{\infty} g(E) f(E-E_f) dE \quad (1)$$

où $g(E)$ est la densité d'états effective et $f(E-E_f)$ le taux d'occupation d'un niveau d'énergie E selon la statistique de Fermi-Dirac, E_f étant le niveau de Fermi;

- dans l'approche quantique :

$$n(x) = g_{2d}(x) \sum_i |\Psi_i(x)|^2 \ln(1 + e^{(E_i - E_f)/kT}) \quad (2)$$

où $g_{2d}(x)$ est la densité d'états d'un système bidimensionnel, et où les Ψ_i et E_i sont solution de l'équation

$$-\frac{1}{2} \hbar^2 d(m^{*-1} d\Psi/dx)/dx + E_c(x) \Psi(x) = E \Psi(x)$$

$m^*(x)$ est la masse effective d'un électron de conduction dans le matériau et est constant dans chaque couche. L'équation de Schroedinger doit être résolue sur un domaine plus large que la région dans laquelle les effets quantiques sont appréciables et en imposant des conditions aux bords sur les fonctions d'onde $\Psi(x)$ telles que le comportement quantique rejoigne le comportement classique aux bords.

Dans les deux cas, il est nécessaire de déterminer $E_c(x)$, donnée par :

$$\begin{aligned} E_c(x) &= E_{c0} - qV(x) \\ d(\epsilon dV/dx)/dx &= -\rho(x) \\ \rho(x) &= q(p(x) - n(x) + N_d^+ - N_a^-) \end{aligned} \quad (3)$$

E_{c0} est constant dans chaque couche mais change abruptement aux hétérojonctions. N_d^+ et N_a^- sont les densités de donneurs respectivement accepteurs ionisés. Les conditions aux bords pour l'équation de Poisson (3) dépendent du domaine sur lequel cette équation est résolue et de la tension appliquée entre la grille et le substrat.

III. Méthodes de résolution et approximations

Dans l'approche semi-classique, nous résolvons de manière itérative l'équation de Poisson (3), évaluant $n(x)$ dans le formalisme semi-classique. On obtient ainsi $E_c(x)$ et $n(x)$. Dans l'approche quantique, nous calculons $n(x)$ selon la formule 2 en utilisant dans l'équation de Schroedinger le résultat semi-classique pour $E_c(x)$. On peut ainsi comparer pour le même $E_c(x)$ les densités d'électrons dans les cas semi-classique et quantique. L'équation de Schroedinger est résolue numériquement sur un domaine étendu en imposant que les fonctions d'onde soient telles que la densité quantique d'électrons soit égale à la densité classique aux bords du domaine.

Les résultats de la littérature avec lesquelles nous comparerons les nôtres sont calculés dans le formalisme quantique, en approximant $E_c(x)$ dans la couche 1 par un puits triangulaire infini. La pente du puits et la position de son minimum par rapport au niveau de Fermi sont déterminées en exigeant que la charge totale dans la couche 1 soit égale et de signe opposée à la charge totale dans la couche 3. Différentes approximations sont utilisées pour l'évaluation de la charge dans la couche 3.

IV. Résultats

Une grandeur importante pour les caractéristique électriques du transistor est l'intégrale N_s de la densité d'électrons dans le gaz bidimensionnel. Nous avons reporté la variation de N_s en fonction de paramètres structuraux du TEGFET et de la valeur de la discontinuité E_c dans $E_c(x)$, dans le but de comparer les résultats obtenus par les différentes approches.

La figure 3 montre N_s en fonction du dopage net N_d de la couche 3, pour le cas où l'épaisseur de la couche 2 est égale à zéro, et le dopage résiduel (non intentionnel) de la couche 1 est négligeable.

La figure 4 montre N_s en fonction de l'épaisseur W de la couche 2 pour le cas où le dopage de la couche 3 est égal à 10^{18} cm^{-3} .

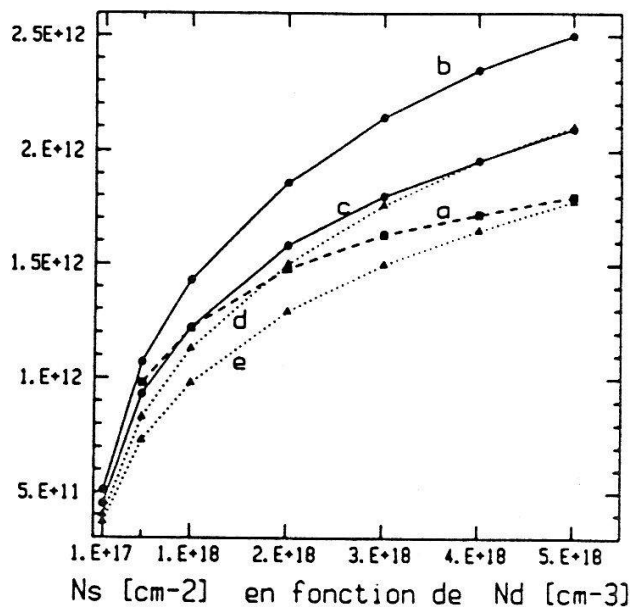


figure 3

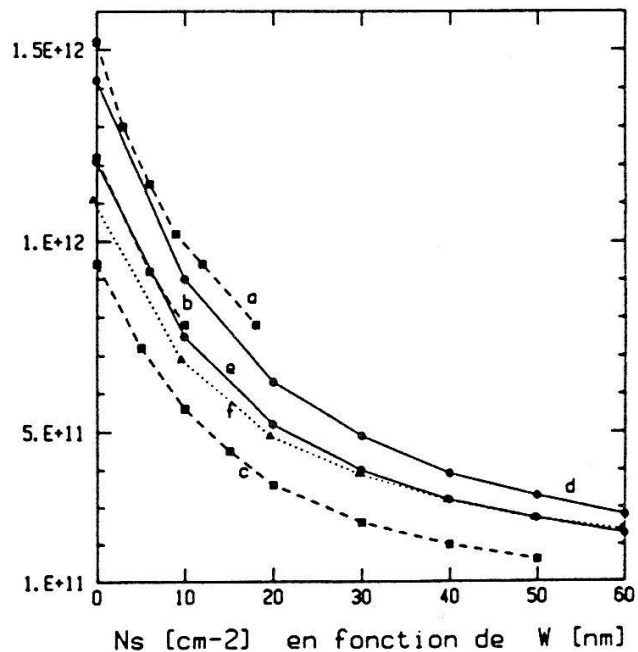


figure 4

figure 3:

- (a) : réf.(1), $E_c=300\text{meV}$
- (b) : semi-classique, $E_c=300\text{meV}$
- (c) : quantique, $E_c=300\text{meV}$
- (d) : semi-classique, $E_c=240\text{meV}$
- (e) : quantique, $E_c=240\text{meV}$

figure 4:

- (a): réf.(2), $E_c=300\text{meV}$, $T=300\text{K}$, couche 1 dopée p à 10^{14}cm^{-3}
- (b): réf.(1), $E_c=300\text{meV}$, $T=300\text{K}$, couche 1 non dopée
- (c): réf.(3), $E_c=300\text{meV}$, $T=77\text{K}$, couche 1 dopée p à $5 \cdot 10^{14}\text{cm}^{-3}$
- (d): semi-class., $E_c=300\text{meV}$, $T=300\text{K}$, couche 1 dopée p à $5 \cdot 10^{14}$
- (e): semi-class., $E_c=240\text{meV}$, $T=300\text{K}$, couche 1 dopée p à $5 \cdot 10^{14}$
- (f): quantique, $E_c=300\text{meV}$, $T=300\text{K}$, couche 1 dopée p à $5 \cdot 10^{14}$

Nous avons observé dans d'autres simulations qu'un changement de la température de 77K à 300K change le résultat de moins de 5%.

V. Discussion

Ns dépend de manière critique de deux grandeurs : la pente moyenne de $E_c(x)$ dans le puits, et la différence d'énergie entre le fonds du puits et le niveau de Fermi. Ns diminue quand la pente ou la différence augmentent, aussi bien dans le cas semi-classique que dans le cas quantique. Ces deux grandeurs sont influencées par les caractéristiques de la structure de la manière suivante : Une augmentation du dopage de la couche 3 ou de la valeur de la discontinuité dans E_c abaissent le fonds du puits par rapport au niveau de Fermi. Une augmentation de l'épaisseur de la couche 2 hausse le fonds du puits et affaiblit la pente. Une augmentation du dopage résiduel p de la couche 1 accroît la pente. Ceci explique l'allure des courbes des figures 3 et 4.

Sur la figure 4, les courbes extrémales (a et c) sont les deux obtenues par l'approche quantique avec l'approximation du puits triangulaire. Pour la courbe a, le calcul a été fait avec deux niveaux dans la formule (2), la courbe c avec un seul niveau. (Lorsque nous limitons la sommation dans la formule (2) à 1 terme, nous trouvons $N_s = 7,27 \cdot 10^{11}\text{cm}^{-2}$ au lieu de $11,1 \cdot 10^{11}\text{cm}^{-2}$ pour le premier point de la courbe f, figure 4.). L'influence de la différences de température est négligeable. On constate donc que l'écart entre les résultats obtenables avec un modèle donné (dans cet exemple le modèle à puits triangulaire) peut être plus grand que l'écart introduit par le choix entre les approches semi-classique et quantique.

La réf.4 compare les valeurs trouvées pour Ns dans les approches semi-classique, quantique exacte et quantique avec l'approximation du puits triangulaire. Pour un cas de structure donné, les résultats sont (voir fig.3 de la réf.4) :

- semi-classique : $N_s = 22,8 \cdot 10^{11} \text{cm}^{-2}$
- quant. exacte : $N_s = 20 \cdot 10^{11} \text{cm}^{-2}$
- quant., puits triang. : $N_s = 17 \cdot 10^{11} \text{cm}^{-2}$

Dans ce même cas, nous obtenons $N_s = 23,5 \cdot 10^{11} \text{cm}^{-2}$ avec l'approche semi-classique, et $N_s = 19,6 \cdot 10^{11} \text{cm}^{-2}$ avec l'approche quantique (avec $E_c(x)$ = solution du cas semi-classique).

On constate que les résultats semi-classiques sont proches des résultats quantiques. Le puits apparaissant dans $E_c(x)$ est trop large (typiquement cinq fois plus large que la longueur d'onde de De Broglie associée au premier niveau propre) pour que les effets quantiques sur N_s puissent être importants. En effet, l'influence de la valeur de E_c sur laquelle il y a 20% d'incertitude, est aussi importante que celle du choix de l'approche. Néanmoins, les effets quantiques affectent la position de la densité d'électrons maximale dans la couche 1. Ceci est montré sur l'exemple de la figure 5.

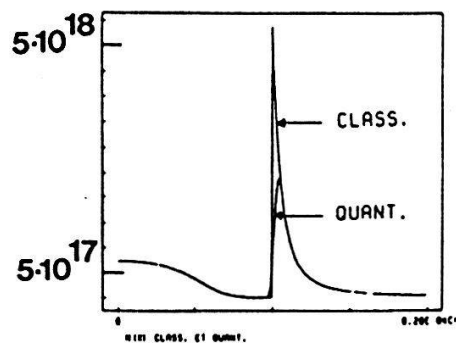


figure 5

Le calcul quantique de N_s se justifiera dans le cas de structures avec une suite alternée de couches minces en GaAs et AlGaAs (donc plusieurs gaz bidimensionnels en parallèle) dans lesquelles la largeur des puits est donnée par l'épaisseur des couches en GaAs. Aussi, un calcul quantique permet de mieux évaluer la mobilité des électrons dans le gaz bidimensionnel [5].

Références :

- [1]: K.Lee, M.Shur, T.J.Drummond, M.Morkoc, J.Appl.Phys. 54, 2093 (1983)
- [2]: D.Delagebeaudeuf, N.T.Linh, Trans.El.Dev. ED-29, 955 (1982)
- [3]: K.Hirakawa, H.Sakaki, J.Yoshino, Appl.Phys.Lett. 45, 253 (1984)
- [4]: J.Yoshida, Trans.El.Dev. ED-33, 154 (1986)
- [5]: T.Ando, J.Phys.Soc.Japan 51, 3900 (1982)

ELECTRICAL RESISTIVITY OF $\text{TmSe}_{1-x}\text{Te}_x$ IN FUNCTION OF PRESSURE AND TEMPERATURE

J. Neuenschwander and P. Wachter

Laboratorium für Festkörperphysik, ETH Zürich, 8093 Zürich

$\text{TmSe}_{1-x}\text{Te}_x$ alloys with $x > 0.4$ reveal a pressure induced semiconductor-to-metal-transition (SMT) (1). Volume-pressure measurements at room temperature showed that already in the semiconducting regime a marked softening of the bulk modulus of the crystals takes place, indicating a valence transition of the Tm ions. In this pressure region, however, this phenomenon has no counterpart in the resistivity-pressure-curves at room temperature. However, the lower the temperature the more sensitive resistivity should be to the detailed structure of the lower part of the conduction band, where indeed we expect an influence of the energetically close 4f-electrons.

We have now investigated the resistivity of the compounds with $x=0.55$ and 0.68 under high pressure at low temperature (2). Below 250 K and most prominent at 5 K we observe above a temperature and composition dependent pressure an increase of resistivity with increasing pressure, followed again by a decrease and a SMT (Fig.1). A possible interpretation of this peak could be the onset of admixture of f-character into the d-conduction band with a corresponding decrease of mobility of carriers. Within the framework of a simple model the peak heights can be understood qualitatively as well as quantitatively. We assume that the 4f-electrons change the low lying 5d-band states in such a way that thermally excited electrons in this part of the conduction band have a larger effective mass m^* and a lower mobility μ than energetically higher states. Taking Boltzmann statistics and $\mu \propto m^{*-5/2}$ (3) we can deduce from the resistivity peak heights that in the lowest ~ 20 meV of the 5d-band the effective masses are enhanced by two or three orders of magnitude. The exact numbers depend on the composition. Large effective masses are reminiscent of heavy fermion systems (4).

At 1.8 GPa, a pressure which is well above the SMT pressure (Fig.1) of $\text{TmSe}_{0.45}\text{Te}_{0.55}$ at room temperature, we find the resistivity of this compound to increase with lowering the temperature down to about 7 K, below this temperature the resistivity decreases again due to the onset of magnetic order.

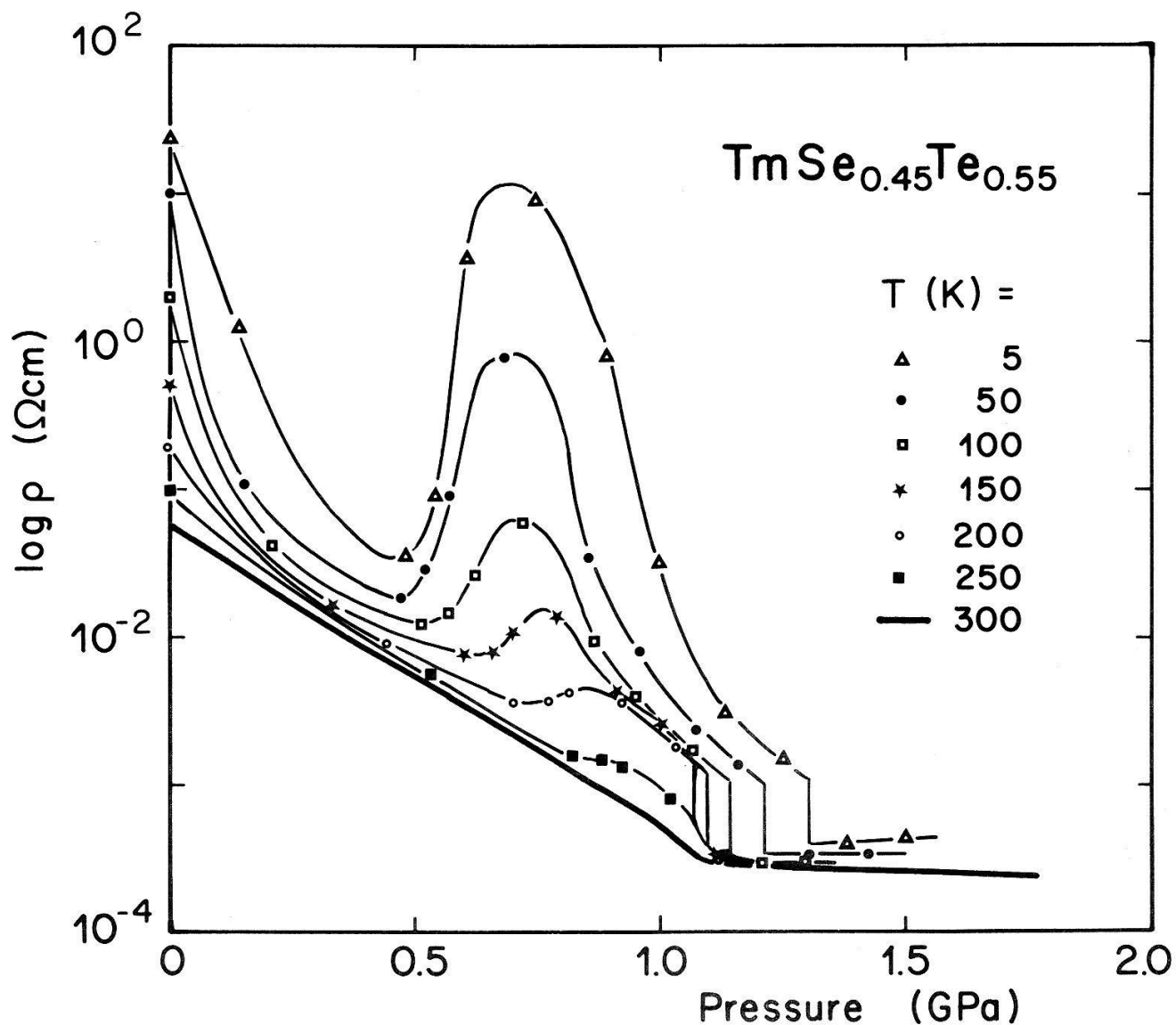


Fig.1: Pressure dependence of resistivity of $\text{TmSe}_{0.45}\text{Te}_{0.55}$ for various temperatures. The thin solid lines are guides to the eye, for temperatures below 200 K a first order SMT is suggested (2).

The initial rise of resistivity is in accord with the existence of a small gap. The corresponding slope of the $\log \rho$ vs. $1/T$ curve, however, steadily decreases with decreasing temperature. In the temperature range of 50-100 K it would indicate an activation energy of about 1 meV, being a typical order of magnitude for hybridization gaps. Thus we have been able to demonstrate that the semiconductor gap of $\text{TmSe}_{0.45}\text{Te}_{0.55}$ (about 140 meV at ambient pressure) evolves under pressure into a hybridization gap.

References

- (1) H. Boppart, J. Magn.&Magn.Mater. 47&48 (1985)436
- (2) J. Neuenschwander and P. Wachter, Int. Conf. on Anomalous Rare Earths and Actinides, Grenoble 1986, J. Magn.&Magn.Mater. (in press)
- (3) W. Shockley, Electrons and Holes in Semiconductors, Van Nostrand, New York 1950, p. 278
- (4) e.g. R.G. Stewart, Rev. Mod.Phys. 56(1984)755 and P. Wachter and G. Travaglini, J. Magn.&Magn.Mater. 47&48(1985)423

Analyse du signal d'oxygène mesuré par SIMS dans des couches d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

T. Achtnich, M.A. Py, G. Burri*, M. Ilegems
IIME EPFL, *IPE Université, CH- 1015 Lausanne

La spectrométrie de masses d'ions secondaires (SIMS) est utilisée pour l'analyse du contenu d'oxygène dans des multicouches $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ / GaAs. Le signal d'oxygène résulte d'une part de l'oxygène incorporé pendant la croissance et d'autre part de l'oxygène adsorbé lors de l'analyse SIMS. Une méthode permet de séparer ces deux contributions.

En outre, l'analyse SIMS a permis de mettre en évidence un phénomène de rejet de l'oxygène hors des couches d'AlAs lors de la croissance épitaxiale par jets moléculaires.

Influence des paramètres de croissance sur l'incorporation d'oxygène dans des couches d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ crûes par MBE

M.A. Py, T. Achtnich, G. Burri*, M. Ilegems
IIME EPFL, *IPE Université, CH- 1015 Lausanne

Par spectrométrie de masses d'ions secondaires (SIMS) sur des multicouches $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ / GaAs crûes par épitaxie à jets moléculaires (MBE), on étudie l'influence de divers paramètres de croissance tels que la composition x d'aluminium, la température du substrat et la pression d'arsenic sur le contenu d'oxygène des couches. L'oxygène étant connu comme produisant un centre de recombinaison non-radiatif, on corrèle les résultats SIMS et l'intensité intégrée de photoluminescence à 2 K de deux couches d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0.22-0.24$) crûes à 600 C et 700 C.

Lebensdauer von photoerzeugten Ladungsträgern in Halbleiterpulvern

B. Jenny und P. Pichat, Ecole Centrale de Lyon, Equipe CNRS Photocatalyse, F-69131 Ecully cedex, France

Messungen der O_2 -Quantenausbeute in Funktion der Lichtintensität für die photokatalytische Umsetzung von H_2O_2 in Suspensionen von TiO_2 (Degussa-P25) zeigen einen abrupten Abfall der Ausbeute oberhalb einer charakteristischen Intensität. Dieser ist durch das Einsetzen eines Rekombinationsprozesses zweiter Ordnung der Ladungsträger bedingt, was Rückschlüsse auf deren Lebensdauer, die Zahl der Elektron-Loch-Paare, sowie auf die Bulk- und Oberflächenrekombinationsprozesse ermöglicht. Halbleitermaterialien mässiger Güte können, falls in Form genügend feiner Pulver vorliegend, bulkdefektfreie Photokatalysatoren mit chemisch passivierten Oberflächenrekombinationszuständen liefern.

Amorphe Metalle, Defekte

High-frequency dispersion in $\text{KTa}_{1-x}\text{Nb}_x\text{O}_3$

M. Maglione and S. Rod, Institut de Physique Expérimentale, EPFL, 1015 Lausanne, Switzerland

U.T. Höchli, IBM Research Division, Zurich Research Laboratory, 8803 Rüschlikon, Switzerland

Abstract. We report on the complex dielectric constant $\epsilon^*(f)$ at temperatures $4\text{ K} < T < 80\text{ K}$ and for frequencies ranging from 10^6 Hz to 10^9 Hz . The dispersion curves obtained on $\text{KTa}_{1-x}\text{Nb}_x\text{O}_3$ mixed crystals indicate that the ferroelectric transition is driven by a relaxational rather than a resonant polar mode.

1. Introduction

Potassium tantalate and its isomorph potassium-tantalate-niobate (KTN) have long been considered prototype displacive ferroelectrics: they owe their ferroelectric polarization essentially to displacement of the Ta ion with respect to its centrosymmetric site in the perovskite structure [1, 2]. This attractive concept has been recently questioned on the basis of dielectric data taken under pressure [3] and subsequent investigations by birefringence [4] and nuclear magnetic resonance [5] debated on the existence of permanent dipoles in both phases. Fast reorientations of such dipoles at frequency ω would make the crystal look cubic on time averages larger than ω^{-1} . Upon lowering T , such motions freeze out, and the resulting polar state might be disordered or ordered.

Dielectric relaxation is very sensitive to the onset of polar order or disorder: at the transition temperature, the zero-frequency dielectric response becomes maximum, and dielectric dispersion reveals the dynamic and the ordering of reorienting dipoles. These reorientation rates in KTN turn out to be in the range of 10^6 to 10^9 Hz ; a range requiring guided-line calibration since the sample is in liquid-He environment.

2. Experimental

The mixed crystals were grown by the slow cooling method described by Rytz and Scheel [6]. Samples of $1 \times 1 \times 0.7\text{ mm}^3$ were cut, polished and electroded by sputtering or evaporation of gold.

The high-frequency experiment poses a problem because of the physical distance of the liquid-He cooled sample from the bridge connector. Impedance of the leads had to be calibrated at each frequency, and numerous tests were performed on samples with known characteristics. On the basis of these calibrations, we limited the error owing to the coaxial leads to less than 1% of the capacitance measured. This corresponds to the accuracy of the bridge itself as quoted by the manufacturer [7].

The samples mounted in the (commercial) holders set up their own resonances. To keep those above the useful frequency range of the set-up, the effective dimensions of the sample $d^* = d_0\sqrt{\epsilon}$ had to be much smaller than the wavelength of light in the coaxial line, $\sim 20\text{ cm}$. For higher dielectric KTN (ϵ up to 3×10^4), this meant reducing sample sizes below 1 mm^3 .

3. Results

Data for $\epsilon_1(\omega)$ and $\epsilon_2(\omega)$ were obtained on $\text{KTa}_{0.98}\text{Nb}_{0.02}\text{O}_3$ at 20 different temperatures. Those of ϵ_2 were plotted versus $\ln\omega$ with T as a parameter. The data are shown in Fig. 1, and indicate that to a good approximation the ϵ_2 versus $\ln\omega$ curve is given by a monodispersive law labeled D for Debye [8] (full curve). A slightly improved curve is the dotted one labeled W (for Wagner) [9]. In these plots, dispersion frequency ω associated to the center of the curve is 2π times the inverse hopping rate of the dipoles, and integral $\int \epsilon_2(\ln\omega) d \ln\omega$ is the dielectric response owing to the dipoles. In Fig. 2, we have plotted hopping rates (Ω) and inverse dipolar susceptibility (ϵ_d^{-1}) as functions of temperature. It is evident that near the minimum of ϵ_d^{-1} , the curves are approximately straight lines with a common temperature as origin. This temperature corresponds to the onset of spontaneous polarization observed in the same sample [10].

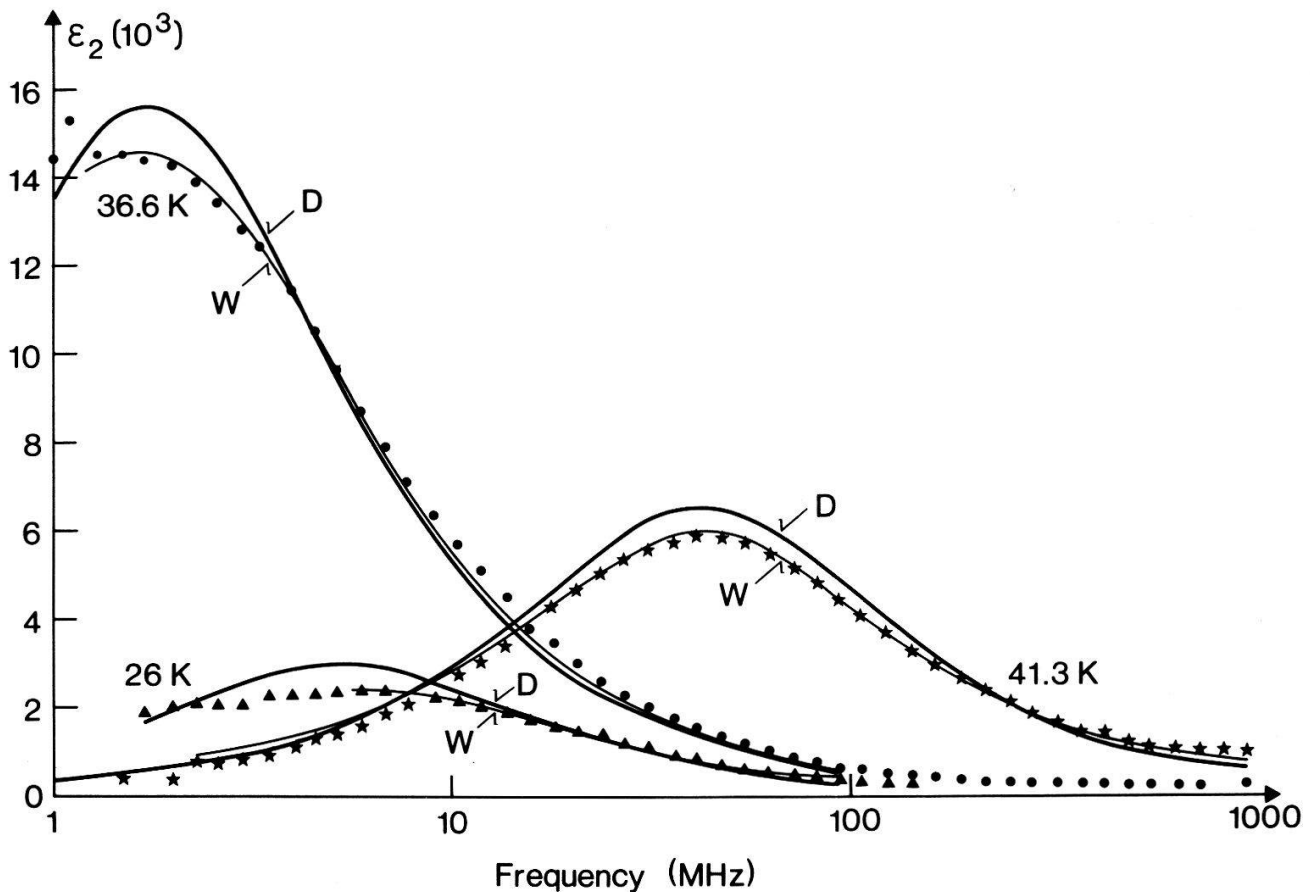


Figure 1

Dielectric susceptibility of $\text{KTa}_{0.98}\text{Nb}_{0.02}\text{O}_3$. Imaginary part of ϵ^* versus $\ln\omega$. Full curve: monodispersion (Debye); hatched curve: polydispersion (Wagner); label: temperature.

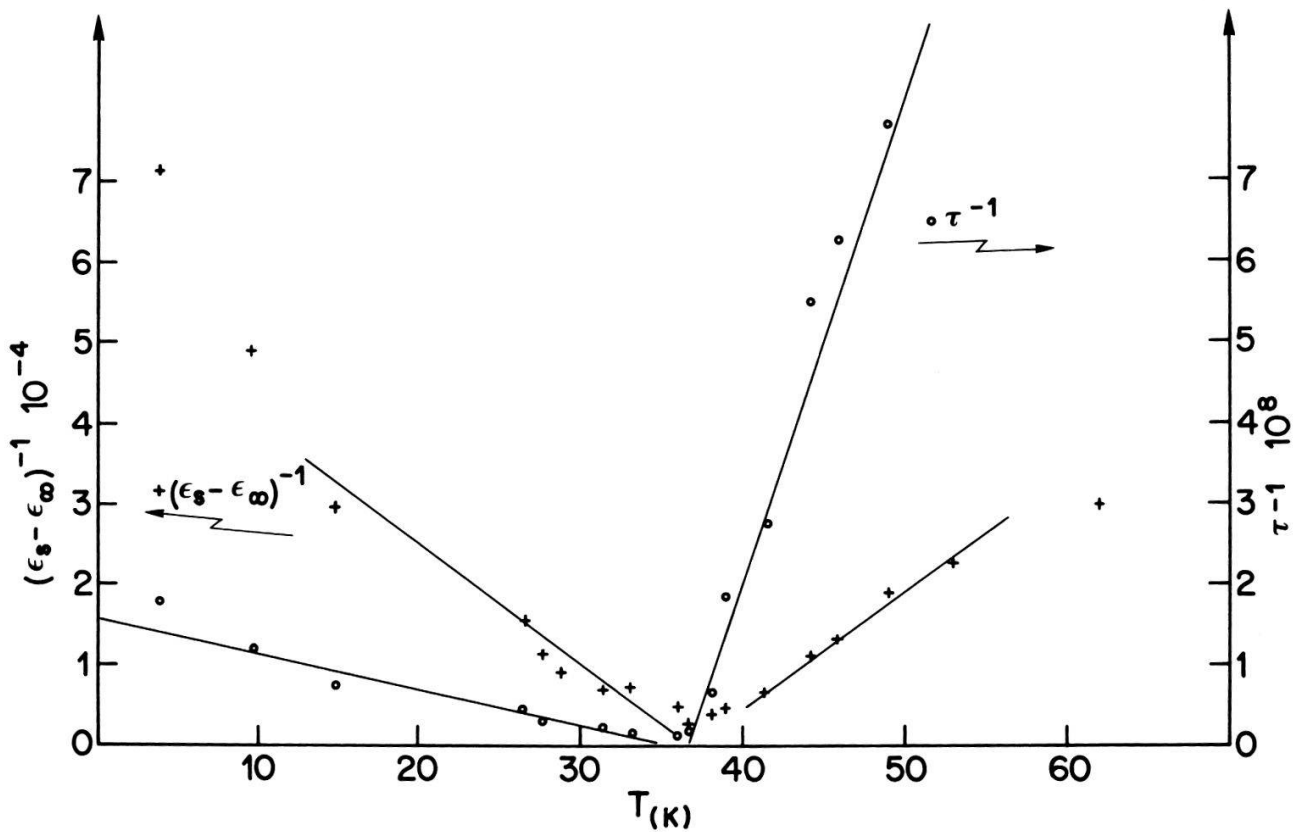


Figure 2

Dispersion step ϵ_d^{-1} and relaxation rate Ω as functions of temperature.

4. Interpretation

Maximum dielectric response, minimum relaxation rate and the onset of electric polarization all occur at the same temperature. This temperature, T_c , thus marks the separation between a paraelectric and a polar phase, as stated previously many times. Closer inspection of the data now allows us to elucidate the mechanism of the transition and the nature of the polar phase. The earliest picture of a KTN-type polar phase implied correlated displacements of the Ta^{5+} ion (mainly), fluctuating above and static below T_c . Associated to such displacements is an optic mode whose frequency goes to zero at T_c . The corresponding response [11]

$$\epsilon^*(\omega) = 1/(\omega^2 - \omega_0^2 + j\Gamma\omega) \quad (1)$$

gives resonant behavior, and dispersion takes place around ω_0 , the soft-mode frequency. At 36 K, the dielectric response disperses however at about 10^8 s^{-1} , where $\omega_{\text{soft}} \sim 10^{11} \text{ s}^{-1}$. This discrepancy and the observation near monodispersion (instead of resonance) rules out the soft mode as a mechanism for condensation into a polar phase. Instead, permanent dipoles, such as present in NaNO_2 , give rise to a response of the type

$$\epsilon^*(\omega) = \epsilon_d/(1 + j\omega\tau). \quad (2)$$

When plotted as ε_2 versus $\ell n \omega$, the full curve of Fig. 1 results, and near T_c parameters $\varepsilon_d^{-1}(T) \sim (T - T_c)$ and $\tau^{-1}(T) \sim T - T_c$ (Fig. 2) are found in agreement with the predictions for an order-disorder transition.

Finally, if permanent dipoles undergo a transition from dynamic disorder (space and time average $\bar{p}^2 = 0$) to static disorder ($\bar{p}^2 \neq 0$), then the findings [9, 11] will be

$$\varepsilon^*(\omega) = \varepsilon_d \int d\tau g(\tau)/(1 + j\omega\tau), \quad (3)$$

where ε_d is as above, $g(\tau)$ a distribution of τ (several decades wide) and $\tau^{-1} = C \exp(-E/kT)$.

Despite the fact that equation (3) introduces an additional parameter, namely, the width of a normalized Gaussian, improvement of the fit is marginal, and certainly the behavior of τ versus T in KTN is in contrast to equation (3).

Thus, we maintain that the preponderant dielectric response is explained in terms of permanent dipoles which slow down critically at T_c much as NO_2 dipoles in NaNO_2 . While dielectric data do not reveal the nature of the dipoles, magnetic resonance data indicate that the polar objects are not single Ta^{5+} or Nb^{5+} displaced ions, but coherent polar regions of about 100 unit-cell size [5]. The phenomena observed by Raman spectroscopy [1] are much weaker (since at 10^9 Hz, ε is already reduced by a factor of 100) and so are the phenomena observed (and debated) [3-5] at low frequency under pressure.

We conclude that Nb in KTaO_3 apparently induces an (almost) ordered polar state, called ferroelectric, although, owing to different binding characteristics of Nb-O (with respect to Ta-O) this crystal does not possess periodic symmetry. While deviations from the order-character of the polar phase are expected, they are probably weak, and it is conceivable that pressure-induced effects and the additional Raman mode (originally interpreted as soft mode) are signs of intrinsic disorder.

Thanks are due to M. Fazan for technical assistance.

REFERENCES

- [1] P. A. FLEURY and D. M. WORLOCK, Phys. Rev. Lett. 18, 665 (1967).
- [2] M. E. LINES and A. M. GLASS, in *Principles and Applications of Ferroelectrics and Related Material* (Clarendon, Oxford, 1977), p. 241.
- [3] G. A. SAMARA, Phys. Rev. Lett. 53, 298 (1984).
- [4] W. KLEEMANN, F. J. SCHAEFER and D. RYTZ, Phys. Rev. Lett. 54, 2038 (1985).
- [5] J. J. V. d. KLINK, S. ROD, and A. CHÂTELAIN, Phys. Rev. B 33, 2084 (1986).
- [6] D. Rytz and H. J. Scheel, J. Cryst. Growth 59, 468 (1982).
- [7] Hewlett Packard's hp 4191 A.
- [8] See [2], p. 217 and 404.
- [9] K. W. WAGNER, Ann. Phys. (Leipzig) 40, 817 (1913); see also [11].
- [10] L. A. BOATNER, U. T. HÖCHLI and H. WEIBEL, Helv. Phys. Acta 50, 620 (1977).
- [11] U. T. HÖCHLI, Phys. Rev. Lett. 48, 1494 (1982).

Physical Properties of Glassy and Quasicrystalline Pd-U-Si

P.H. Grütter, H. Bretscher, G. Indlekofer, H. Jenny, T. Zingg, R. Lapka, P. Oelhafen, and H.-J. Güntherodt

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

Glassy $\text{Pd}_{60}\text{U}_{20}\text{Si}_{20}$ has been studied by DSC and XRD to characterize the phase transformation into an icosahedral phase and into the crystalline state. Electrical resistivity, Hall coefficient and magnetic susceptibility data upto high temperatures are presented. The electronic structure has been investigated by XPS, UPS and the top surface layers have been probed by ISS. All measured electronic and magnetic properties show a strong similarity between the icosahedral and the glassy state.

Photoelectron spectroscopy on amorphous Cu-Te thin films

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

E. Compans, P. Häussler, P. Rieger, F. Baumann, Physikalisches Institut, Universität Karlsruhe, Engesserstr. 7, D-7500 Karlsruhe

Amorphous films of $\text{Cu}_x\text{Te}_{1-x}$ have been prepared by evaporation. The electronic structure of the samples has been investigated with ultraviolet and X-ray photoelectron spectroscopy. The valence bands indicate a minimum in the electrical conductivity around $x=0.65$. The results are compared with measurements on $\text{Cu}_x\text{Te}_{1-x}$ splats and with published resistivity measurements on Cu-Te melts (1). We will discuss to which extent the electronic structures of liquid and amorphous samples of similar concentrations are analogous.

(1) E.A. Dancy: Trans. Met. Soc. AIME 233 (1965) 270.

Etude de l'oxidation d'alliages de titane après irradiation laser

M. Thuillard and M. von Allmen

Institut für Angewandte Physik, Universität Bern, 3012 Bern

Nous avons étudié l'oxidation de films de Ti et de Ti dopés avec de l'or après irradiation dans l'air avec un laser pulsé Nd:YAG produisant un pulse de 35 ns. La résistance suit une loi logarithmique en fonction du temps similaire à l'oxidation à basse température. Nous avons également déterminé l'influence de la formation d'un plasma sur la cinétique d'oxidation.

Spontane Verglasung metallischer kristalliner Lösungen

A. Blatter und M. von Allmen

Institut für angewandte Physik, Universität Bern, 3012 Bern

Im System Cr-Ti kann die bei hohen Temperaturen stabile, bcc-kristalline feste Lösungsstruktur bereits bei kleinen Abkühlraten metastabil "eingefroren" werden. Um 600°C amorphisiert dieser Zustand spontan. Der spontane Verglasungsvorgang dominiert über die konkurrierende Gleichgewichtsbildung, da zu letzterer Diffusions- und Strukturbarrieren zu überwinden sind. Diese Mechanismen erlaubten uns die Herstellung millimeter-dicker Cr-Ti Gläser. Die mechanischen Eigenschaften solcher Gläser zeigen die für ein aus der Schmelze abgeschrecktes metallisches Glas typische plastische Erhärtung und gleichzeitige elastische Erweichung. Letzteres lässt vermuten, dass die spontane Verglasung auf einem elastischen Relaxationsprozess beruht.

Kalorimetrie an laserverglasten Dünnschichten: Au-Si

N. Koch und M. von Allmen

Institut für Angewandte Physik, Universität Bern, 3012 Bern

Wir untersuchen das Auskristallisieren von laserverglasten Gold-Silizium-Dünnschichtfilmen in einem breiten Kompositionsbereich. Frühere Untersuchungen haben gezeigt, dass die amorphen Legierungen beim Auskristallisieren ein metastabiles Silizid bilden. Elektrische und optische Messungen haben darauf hingewiesen, dass das Silizium in den goldreichen amorphen Legierungen in metallischem Zustand vorliegt. Diese Untersuchungen werden nun ergänzt durch kalorimetrische Messungen, die Resultate mit den vorliegenden Ergebnissen verglichen.

Ordnungseinstellung und Versetzungen in einer metastabilen Ni-12 at.% Ti Legierung

P. Schwander, A. Cerri und G. Kostorz

Institut für Angewandte Physik, ETH-Hönggerberg, 8093 Zürich

Die beim Auslagern einer übersättigten Ni-12 at.% Ti Legierung auftretende metastabile Phase wurde mit verschiedenen Methoden der Transmissionselektronenmikroskopie bei 100 und 200 kV untersucht. Die Ordnungseinstellung wurde bei mehreren Auslagerungszeiten mit hochauflösender Mehrstrahl-Gitterabbildung verfolgt. Anordnungen und Form der Versetzungen wurden mit der Weak-Beam-Methode untersucht. Dabei treten schon bei kleinen Auslagerungszeiten gepaarte Versetzungen auf (Superversetzungen der $L1_2$ -Struktur). Für dieses Phänomen wird eine qualitative Deutung anhand von Gitterkorrelationsfunktionen gegeben. Die Untersuchungen werden mit Resultaten anderer Messmethoden, z.B. Neutronen-Kleinwinkelstreuung, verglichen.

Positronenstudie von Defekten in HfN-SchichtenJ. Brunner

Laboratorium für Festkörperphysik ETH, CH-8093 Zürich

A.J. Perry, GTE Valeron Corp., Troy, 48084 Michigan

Die Ausdehnung des Gitters bei durch reaktives Zerstäuben (PVD) hergestellten HfN-Schichten weist auf eine hohe Defektkonzentration hin. Im Positronen-Lebensdauerspektrum tritt eine Komponente auf, die dem Einfang von Positronen in Leerstellen entspricht. Die Abnahme ihrer Intensität und des Gitterparameters nach dem Anlassen erklärt sich durch die Wanderung von Zwischengitteratomen in die Leerstellen. Die Messungen weisen darauf hin, dass auch noch andere Defektarten vorliegen.

Metallurgie

Diffuse Neutronenstreuung an Al-Cu mit verschiedenen Cu-Isotopen

P.P. Müller, G. Kostorz, L. Reinhard, B. Schönfeld, W. Bührer¹
Institut für Angewandte Physik, ETH-Hönggerberg, 8093 Zürich
¹Lab.f.Neutronenstreuung der ETHZ, c/o EIR, 5303 Würenlingen

Die relativen Beiträge zur diffusen Neutronenstreuung von Al-Cu mit kleinen kohärenten Ausscheidungen (Guinier-Preston-Zonen) können durch Wahl verschiedener Cu-Isotope variiert werden. Ein Al-1,7 at.% ⁶⁵Cu- und ein Al-1,7 at.% ⁶³Cu-Einkristall wurden gleichzeitig 60 Minuten lang bei 80°C ausgelagert. Die diffuse Streuintensität wurde entlang $\langle 00h \rangle$ mit dem Dreiachsenspektrometer des LNS bei $\lambda = 2,34 \text{ \AA}$ gemessen. Es ergaben sich Unterschiede zwischen den mit den üblichen Methoden separierten Nahordnungsintensitäten. Sie deuten darauf hin, dass die dabei verwendeten linearen und quadratischen Terme der nach Atomverschiebungen entwickelten Verzerrungsstreuung nicht ausreichen.

Diffuse Röntgenstreuung an Ni-Al Legierungen

F. Klaiber, B. Schönfeld und G. Kostorz
Institut für Angewandte Physik, ETH-Hönggerberg, 8093 Zürich

Die diffuse Streuintensität nahgeordneter binärer Legierungen setzt sich aus Nahordnungs- und Verzerrungsanteilen zusammen. Diese können nach drei verschiedenen Verfahren aus den gemessenen Daten berechnet werden. Röntgenstreuexperimente mit MoK α -Strahlung wurden an Einkristallen von Ni-9,8 at.% Al und Ni-12,8 at.% Al durchgeführt. Die Warren-Cowley-Nahordnungsparameter α_{lmn} und die Verzerrungsparameter erster Ordnung γ_{lmn}^x wurden nach den verschiedenen Methoden bestimmt. Der Methodenvergleich zeigt eine gute Übereinstimmung für die gefundenen Strukturparameter. Die mittleren nahgeordneten Strukturen werden diskutiert.

Entmischung in Ni-Ti Legierungskristallen

A. Cerri, G. Kostorz, R. Schmelczner und B. Schönfeld
Institut für Angewandte Physik, ETH-Hönggerberg, 8093 Zürich

Entmischung und Ordnungseinstellung in nickelreichen Ni-Ti-Einkristallen wurden mit Neutronenkleinwinkelstreuung (n-KWS) und Röntgenstreuung untersucht. Beim n-KWS-Experiment wurden homogenisierte Ni-9,5 bzw. 12 at.% Ti-Einkristalle in einem Ofen bei 540°C angelassen, und die Entmischung konnte für ca. 4 Stunden im Strahl verfolgt werden. Die Streuintensität zeigt eine deutliche Richtungsabhängigkeit des Streuvektors und die Ausbildung diffuser Intensitätsmaxima zunächst in $\langle 100 \rangle$ -, später in $\langle 110 \rangle$ -Richtungen.

Zum Vergleich wurden die Ueberstrukturreflexe eines Ni-11at.%Ti-Einkristalls, der vergleichbaren Wärmebehandlung unterworfen worden war, mit Röntgenbeugung bei Raumtemperatur untersucht.

Nahordnung in Ni-19,4 at.% Cr

B. Schönfeld, G. Kostorz, F. Klaiber, L. Reinhard, W. Bühner¹
Institut für Angewandte Physik, ETH-Hönggerberg, 8093 Zürich
¹Lab.f.Neutronenstreuung der ETHZ, c/o EIR, 5303 Würenlingen

Nickel-Chrom-Legierungen zeigen eine Anomalie des elektrischen Widerstands ("K-Effekt"), die mit dem Auftreten von Nahordnung zusammenhängen soll. Zur Untersuchung dieses Effekts wurde die diffuse Neutronenstreuung von Ni-19,4 at.% Cr-Einkristallen, die bei 555 und 700°C ausgelagert worden waren, am LNS in Würenlingen bei Raumtemperatur gemessen. Die Streuintensität in (100)- und (110)-Ebenen zeigt, dass diffuse Maxima bei $1\frac{1}{2}0$ auftreten. Die Warren-Cowley-Nahordnungsparameter α_{lmn} wurden nach einem Anpassungsverfahren (kleinste Fehlerquadrate) unter Verwendung von Verzerrungstermen erster und zweiter Ordnung bestimmt. Die Ergebnisse werden mit Literaturwerten für Nickellegierungen niedrigerer Cr-Konzentration verglichen.

Röntgenkleinwinkelstreuung an Al-3 at.% Ag-Einkristallen

Ph. Dubey, G. Kostorz und R. Schmelczer
Institut für Angewandte Physik, ETH-Hönggerberg, 8093 Zürich

Mittels Röntgenkleinwinkelstreuung wurde die Entmischung von Al-3 at.% Ag bei einer Auslagerungstemperatur von 140°C verfolgt. Bereits in der abgeschreckten Probe sind kugelförmige Guinier-Preston-Zonen vorhanden. Im Verlaufe der isothermen Auslagerung bilden sich Plättchen der zweiten metastabilen Phase, γ' . Die Messungen wurden an der neuen Röntgenkleinwinkelstreuanlage des Instituts durchgeführt. Die Anlage ist mit einem Drehanodengenerator (max. Leistung: 15 kW) und einem zweidimensionalen ortsempfindlichen Detektor (100 x 100 mm²) ausgerüstet und ermöglicht die Untersuchung der Kleinwinkelstreuung auch bei niedrigen oder orientierungsabhängigen Streuquerschnitten.

Observations in situ dans le microscope électronique à transmission du mouvement des dislocations dans l'aluminium irradié

D. Gavillet, W.V Green, M. Victoria, EIR - 5303 Würenlingen
R. Gotthardt, J.L. Martin, EPFL - 1015 Lausanne

Des éprouvettes d'aluminium irradiées par des protons de 600 MeV ont été déformées dans un microscope électronique à transmission. L'interaction des dislocations avec la structure de dégâts d'irradiation a ainsi été déterminée. Les observations montrent que les dislocations ont un mouvement saccadé et qu'elles sont épinglées par des obstacles submicroscopiques qui sont probablement des petits amas d'impuretés. Il est également apparu que les bulles d'hélium sont des obstacles moyens à faibles pour le mouvement des dislocations. Un film des séquences intéressantes sera présenté.

BIREFRINGENCE MAGNETIQUE LINEAIRE SPONTANEE DES BORACITES ORTHORHOMBIQUES

M. Clin, J.P. Rivera et H. Schmid, Département de Chimie minérale, analytique et appliquée, Université de Genève, 30 quai Ernest Ansermet, CH 1211, Genève 4

Résumé : Les composés de la famille des boracites tels $\text{Co}_3\text{B}_7\text{O}_{13}\text{I}$, $\text{Co}_3\text{B}_7\text{O}_{13}\text{Br}$, $\text{Ni}_3\text{B}_7\text{O}_{13}\text{Br}$... présentent la succession de phases suivante : $\bar{\text{F}}43\text{c}1' \rightarrow \text{Pca}2_11' \rightarrow \text{m}'\text{m}2'$. Les biréfringences principales de ces trois composés ont été mesurées dans les phases ferroélectriques ($\text{Pca}2_11'$) et ferromagnétiques faibles ($\text{m}'\text{m}2'$). Ces données expérimentales sont comparées avec les expressions de la biréfringence déduites d'une analyse de théorie des groupes.

1. Introduction

Du point de vue des transitions de phases tant cristallines que magnétiques, la famille des boracites présente une grande variété de situations, qui a été la source de nombreux travaux [1]. Parmi cet ensemble, les composés de formules chimiques $\text{Co}_3\text{B}_7\text{O}_{13}\text{I}$ (Co-I), $\text{Co}_3\text{B}_7\text{O}_{13}\text{Br}$ (Co-Br) et $\text{Ni}_3\text{B}_7\text{O}_{13}\text{Br}$ (Ni-Br) font partie d'une classe de matériaux exhibant la séquence de phases suivante : $\bar{\text{F}}43\text{c}1' \rightarrow \text{Pca}2_11' \rightarrow \text{m}'\text{m}2'$. La symétrie de ces composés a été déterminée par les techniques usuelles de diffraction [2,3] et l'observation optique des domaines ferroélectriques et ferromagnétiques [4-7]. Jusqu'à présent, les intérêts des expérimentateurs et théoriciens se sont essentiellement portés vers l'étude de la transition ferroélectrique $\bar{\text{F}}43\text{c}1' \rightarrow \text{Pca}2_11'$ [4,8-14], la transition ferromagnétique faible $\text{Pca}2_11' \rightarrow \text{m}'\text{m}2'$ [2,5-7,15] n'ayant suscité que peu d'études, probablement en partie à cause du domaine des basses températures qui lui est associé. Dans cet article nous rapportons les mesures de biréfringence menées sur ces trois composés, et en discutons les résultats. Les monocristaux sur lesquels nous avons effectué nos mesures ont été synthétisés dans notre laboratoire selon le protocole expérimental de la réaction de transport chimique par voie gazeuse [16].

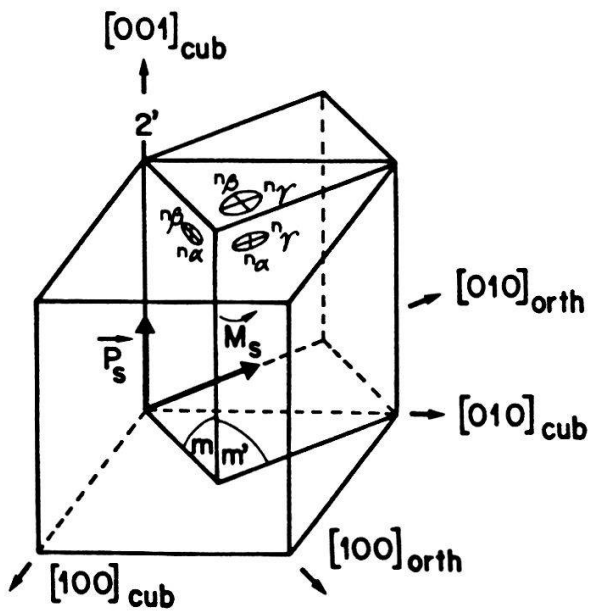


FIGURE 1

Relation entre les mailles cubique et orthorhombique, et orientation des sections de l'indicatrice optique de la boracite Co-I .

2. Résultats expérimentaux

L'orientation des axes orthorhombiques par rapport à la maille cubique (Fig.1) montre que seules deux coupes cristallographiques à savoir $(100)_{\text{cub}}$ et $(110)_{\text{cub}}$ suffisent pour mesurer les trois biréfringences principales dans les phases orthorhombiques. Les mesures ont été effectuées à l'aide d'un compensateur tournant. Les biréfringences magnétiques ont été précisées en utilisant un modulateur photoélastique et un système de détection (microphotomètre, amplificateur à détecteur de phase) travaillant à la fréquence du modulateur. La configuration retenue (axes du modulateur et du cristal à 45° des axes des polariseurs) donne un signal dont l'intensité est proportionnelle à la biréfringence vraie du matériau en diminuant fortement les effets dus à la rotation Faraday [17]. Toutes ces mesures ont été réalisées en lumière rendue monochromatique après passage à travers un filtre interférentiel, sur des monodomaines contrôlés optiquement sous microscope. Sur la figure 2 nous voyons clairement que les biréfringences principales de la boracite Co-I subissent une modification à la transition magnétique qui survient à environ 38 K. Le minimum visible sur les courbes des biréfringences $n_\gamma - n_\alpha$ et $n_\beta - n_\alpha$ ne semble pas associé à un changement de la symétrie

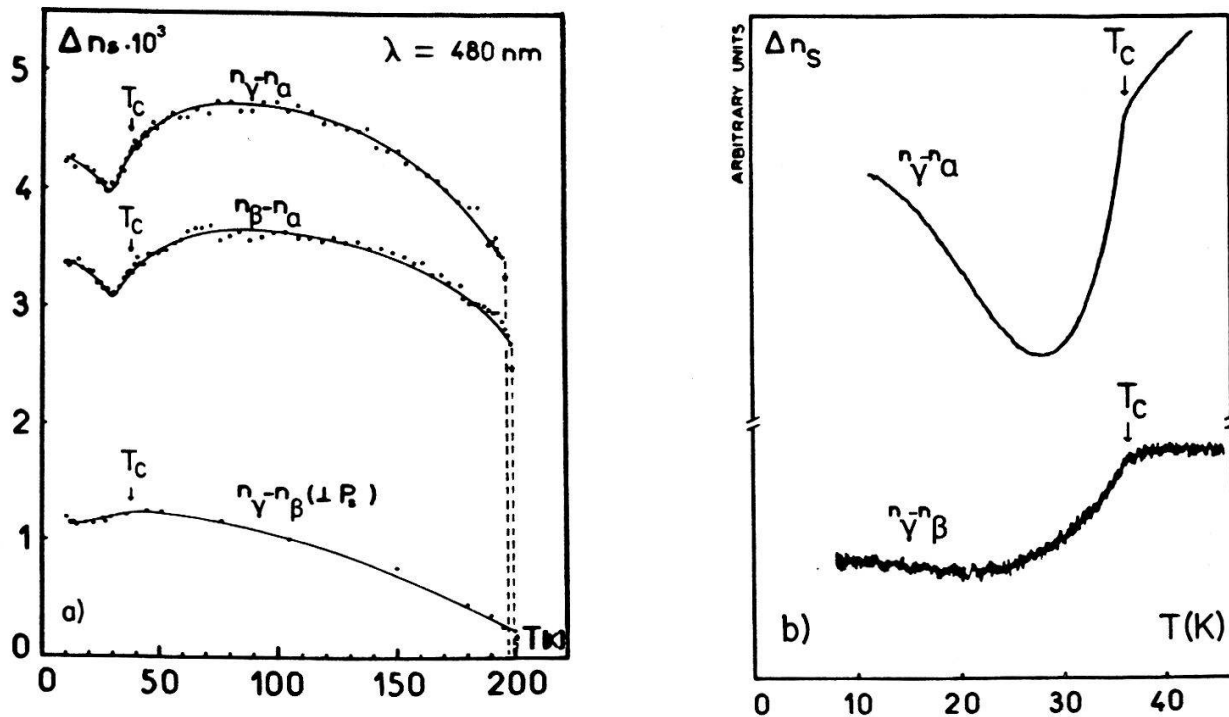


FIGURE 2 Les trois biréfringences principales de la boracite Co-I en fonction de la température. a) Mesures réalisées avec un compensateur tournant. b) Mesures obtenues à l'aide d'un modulateur photoélastique. $\lambda = 480 \text{ nm}$.

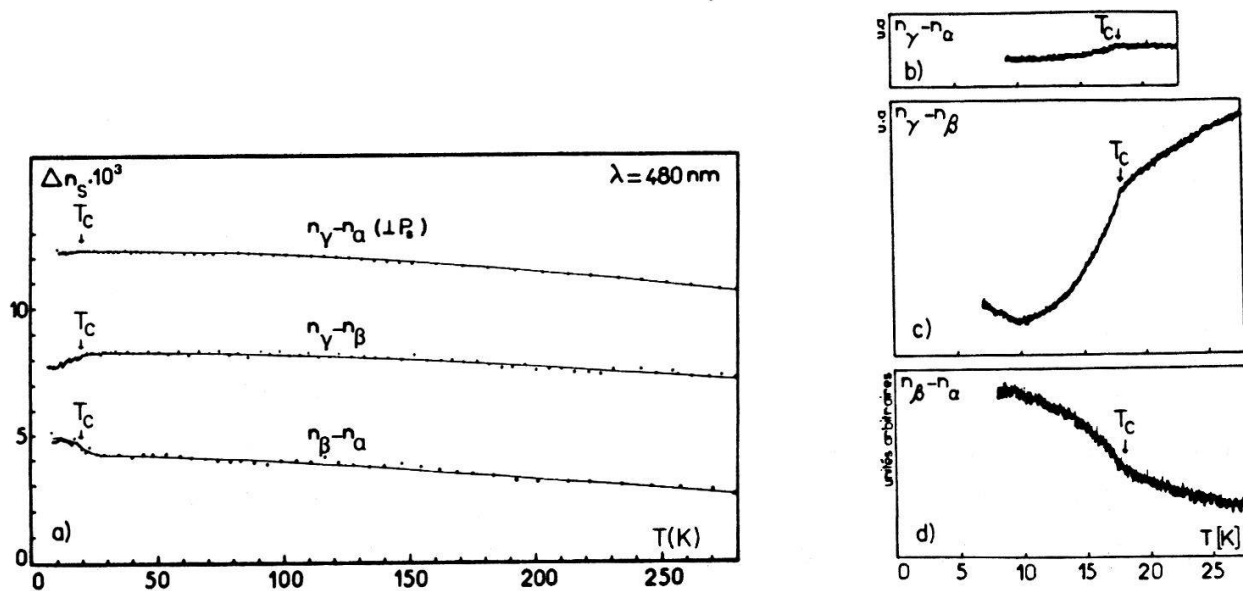


FIGURE 3 Les trois biréfringences principales de la boracite Co-Br en fonction de la température. a) Mesures effectuées avec un compensateur tournant. b), c), d) Mesures obtenues à l'aide d'un modulateur photoélastique. $\lambda = 480 \text{ nm}$.

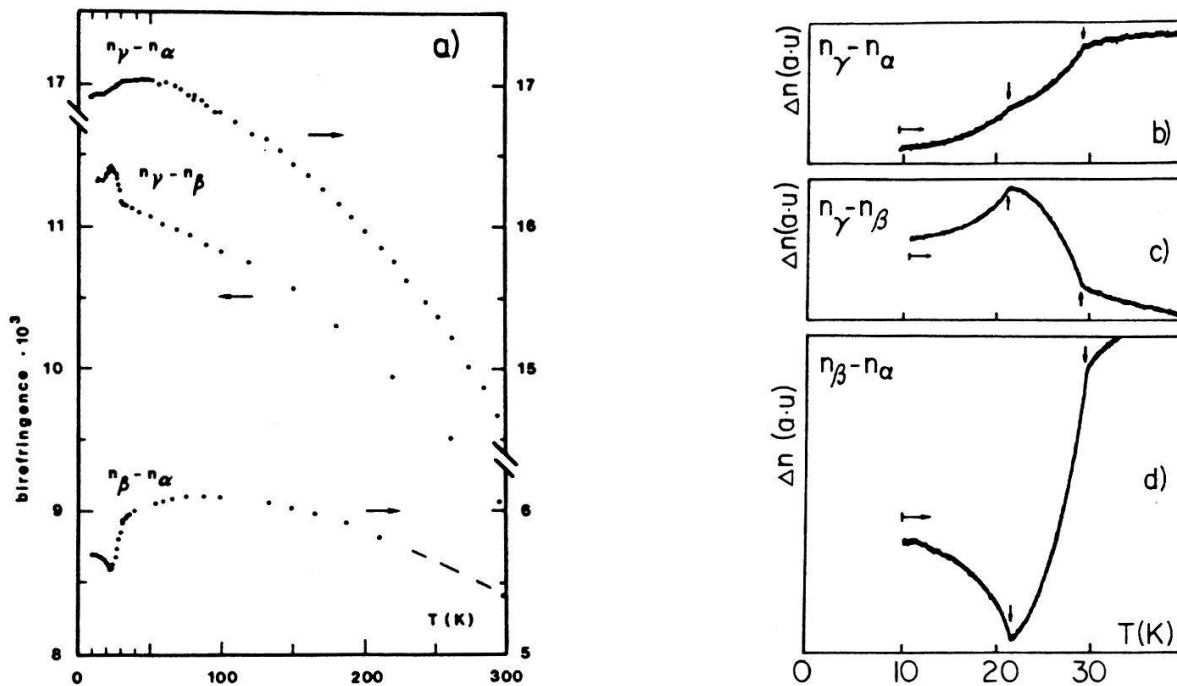


FIGURE 4 Les biréfringences principales de la boracite Ni-Br en fonction de la température. a) Mesures effectuées avec un compensateur Babinet-Soleil. b), c), d) Détail des biréfringences mesurées en utilisant un modulateur photoélastique. $\lambda = 480 \text{ nm}$.

magnétique $m'm2'$, mais à un accroissement de l'anisotropie magnétique comme plusieurs observations le suggèrent [7]. La boracite Co-Br subit une transition de phase magnétique à environ 17,5 K qui se reflète sur les biréfringences principales, comme la figure 3 le montre. La boracite Ni-Br présente deux transitions magnétiques successives, la première à environ 29 K vers une phase de symétrie $m'm2'$, la seconde à 21 K vers une phase de symétrie triclinique [6]. La figure 4 montre le comportement des biréfringences sur ce composé. Dans le paragraphe suivant nous discutons brièvement l'origine possible de ces anomalies.

3. Discussion

Une contribution magnétoélectrique à la biréfringence a été suggérée [18], et des résultats expérimentaux [19] ont été interprétés dans ce sens. Nos mesures bien qu'effectuées sur des matériaux magnétoélectriques indiquent une autre origine, puisque la biréfringence mesurée est indépendante du sens de l'aimantation des domaines magnétiques comme nous avons pu le vérifier. Une analyse dans le cadre de la théorie de Landau a montré que la transition magnétique $Pca2_11' \rightarrow Pc'a2_1'$ est induite par une coreprésentation irréductible de $Pca2_11'$ en centre de zone. Le paramètre d'ordre qui s'identifie à un arrangement antiferromagnétique des moments magnétiques attachés aux atomes métalliques, possède les mêmes propriétés de symétrie que l'aimantation spontanée. La variation de la biréfringence à la transition magnétique résulte de plusieurs contributions, on peut citer les sous-réseaux antiferromagnétiques, la composante magnétique, la variation de la polarisation et de la déformation. Ces diverses origines se traduisent par une perturbation du tenseur des perméabilités diélectriques B_{ij} [20,21], on peut écrire:

$$\Delta B_{ij} = \alpha_{ijkl} L_k L_l + \beta_{ijkl} M_k M_l + \delta_{ijkl} L_k M_l + \gamma_{ijkl} P_k P_l + \zeta_{ijkl} S_{kl} + \dots$$

Où L, M, P, S représentent respectivement le paramètre d'ordre, l'aimantation spontanée, la polarisation et la déformation.

Pour un cristal de symétrie $m'm2'$, les variations de biréfringence s'écrivent en se limitant à la contribution magnétique:

$$\Delta(n_1 - n_2) = -\frac{1}{2}(n_o)^3 [(\alpha_{11} - \alpha_{21})L^2 + (\beta_{12} - \beta_{22})M^2]$$

$$\Delta(n_1 - n_3) = -\frac{1}{2}(n_o)^3 [(\alpha_{11} - \alpha_{31})L^2 + (\beta_{12} - \beta_{32})M^2 + \delta_{66}^{ML}]$$

$$\Delta(n_2 - n_3) = -\frac{1}{2}(n_o)^3 [(\alpha_{21} - \alpha_{31})L^2 + (\beta_{22} - \beta_{32})M^2 + \delta_{66}^{ML}]$$

Ces expressions rendent compte difficilement du comportement des biréfringences $n_\gamma - n_\alpha$ et $n_\beta - n_\alpha$ de la boracite Co-I, puisque les grandeurs L et M ont la même dépendance en température. Une prise

en compte de la contribution due à la polarisation semble s'imposer, celle ci variant comme le carré du paramètre d'ordre. Une autre possibilité serait l'existence d'une réorientation des moments magnétiques à 28 K suggérée par d'autres travaux [2,7].

Remerciements

Les auteurs remercient E.Burkhardt et R.Cross pour la préparation des échantillons. Ce travail a été subventionné par le Fonds National Suisse de la Recherche Scientifique (projet N° 2.643-0.85)

4. Références

- [1] Pour une revue voir par exemple: R.J. Nelmes, J.Phys.C,7, 3840, 1974. P. Tolédano, H. Schmid, M. Clin et J.P. Rivera, Phys.rev B32, 9, 6006, 1985.
- [2] V.P. Plakhtii, A.V. Kovalev, M.N. Bedrizova, I.V. Golosovski et G.T. Andreeva, Sov.Phys.Solid State, 18, 7, 1181, 1976.
- [3] V.Z. Saifudinov, V.I. Bugakov et V.I. Pakhomov, Inorganic materials, 16, 112, 1980.
- [4] H. Schmid et H. Tippmann, Ferroelectrics, 20, 21, 1978.
- [5] I.H. Brunskill et H. Schmid, Ferroelectrics, 36, 395, 1981
- [6] J.P. Rivera, F.J. Schaefer, W. Kleemann et H. Schmid, Jap. Jour.Appl. Physics, 24, Suppl 24-2, 1060, 1985.
- [7] M. Clin, J.P. Rivera et H. Schmid, Jap. Jour. Appl. Physics, 24, Suppl 24-2, 1054, 1985.
- [8] E. Ascher, H. Schmid et D. Tar, Solid State Communications, 2, 45, 1964.
- [9] H. Schmid, H. Rieder et E. Ascher, Solid State Communications, 3, 327, 1965.
- [10] F. Smutny et J. Fousek, Phys.stat.sol, 40, K13, 1970.
- [11] S.N. Drozhdin, B.G. Bochkov, N.D. Gavrilova, T.V. Popova, V.A. Koptsik et V.K. Novik, Sov.Phys.Crystallogr, 20, 4, 526, 1976.

- [12] A.V. Kovalev, V.P. Plakhtii et G.T. Andreeva, J.E.T.P Lett, 27, 12, 637, 1978.
- [13] L.N. Baturon, R.V. Zorin, B.I. Al'shin et V.I. Bugakov, Sov.Phys.Solid State, 23, 3, 525, 1981.
- [14] M.E. Mendoza Alvarez, H. Schmid et J.P. Rivera, Ferroelectrics, 55, 227, 1984.
- [15] P. Tolédano, H. Schmid, M. Clin et J.P. Rivera, Phys.rev B32, 9, 6006, 1985.
- [16] H. Schmid, J.Phys.Chem.Solids, 26, 973, 1965.
- [17] J. Ferré et G.A. Gehring, Rep.Prog.Phys, 47, 513, 1984.
- [18] R.M. Hornreich et S. Shtrikman, Phys.rev, 171, 1065, 1968.
- [19] K. Lio, T. Hoshino et K. Nagata, J.Mag.Mag.Mat, 31, 587, 1983.
- [20] J.F. Nye, Physical Properties of crystals, Clarendon Press, Oxford, 1964.
- [21] R.V. Pisarev, I.G.Sinii, N.N. Kolpakova et Yu. Yakovlev, Sov.Phys.J.E.T.P, 33, 6, 1175, 1971.

NACHWEIS UND EIGENSCHAFTEN FERROELEKTRISCHER 180°-DOMÄNEN IN BiFeO_3 -EINKRISTALLEN

A. Steiner, C. Tabares-Muñoz und H. Schmid, Dép. de Chimie
minérale, analytique et appliquée, Université de Genève,
Quai E. Ansermet 30, CH-1211 Genève 4

Zusammenfassung : Der Perowskit BiFeO_3 zeigt eine rhomboedrische ferroelektrische ferroelastische Phase durchgehend von 4 K bis 1096 K. Der ferroelastische Aspekt kann im optischen Polarisationsmikroskop erfasst werden. Ätzen mit einer 50% $\text{HCl}/\text{H}_2\text{O}$ -Lösung erlaubt ferroelektrische 180°-Domänen innerhalb ferroelastischer Eindomänen sichtbar zu machen. Das Ätzrelief zeigt klar, dass der chemische Angriff parallel der spontanen Polarisation fortschreitet. Die Wände zwischen 180°-Domänen enthalten immer die Orientierung der zugehörigen Polarisationen und sind vorwiegend {112}-Ebenen. Die Analyse der Schnittstellen ferroelastischer Domänen lässt auf bevorzugte Kopf-Schwanz Anordnung der Polarisation verschieden orientierter benachbarter Domänen schliessen.

1. Einleitung

BiFeO_3 besitzt eine ferroelektrische ferroelastische Phase von 4 K bis 1096 K [1] und ist antiferromagnetisch unterhalb von ≈ 643 K [2]. Die zugehörige Raumgruppe wurde als $R3c$ bestimmt [3]. Der gemessene quadratische magnetoelektrische Effekt [4] ist mit den Schubnikov-Punktgruppen $3m$ und $3m1'$ kompatibel.

Bei Raumtemperatur besitzt BiFeO_3 eine Perowskit-Struktur vom Typ $A^{3+}B^{3+}O_3^{2-}$ mit einer schwachen rhomboedrischen Verzerrung der Elementarzelle ($\alpha_{Rh} = 89^\circ 36'$ [5]). Die Sauerstoffoktaeder sind um die Achse der spontanen Polarisation verdreht ($w = 11^\circ 40'$ [6]).

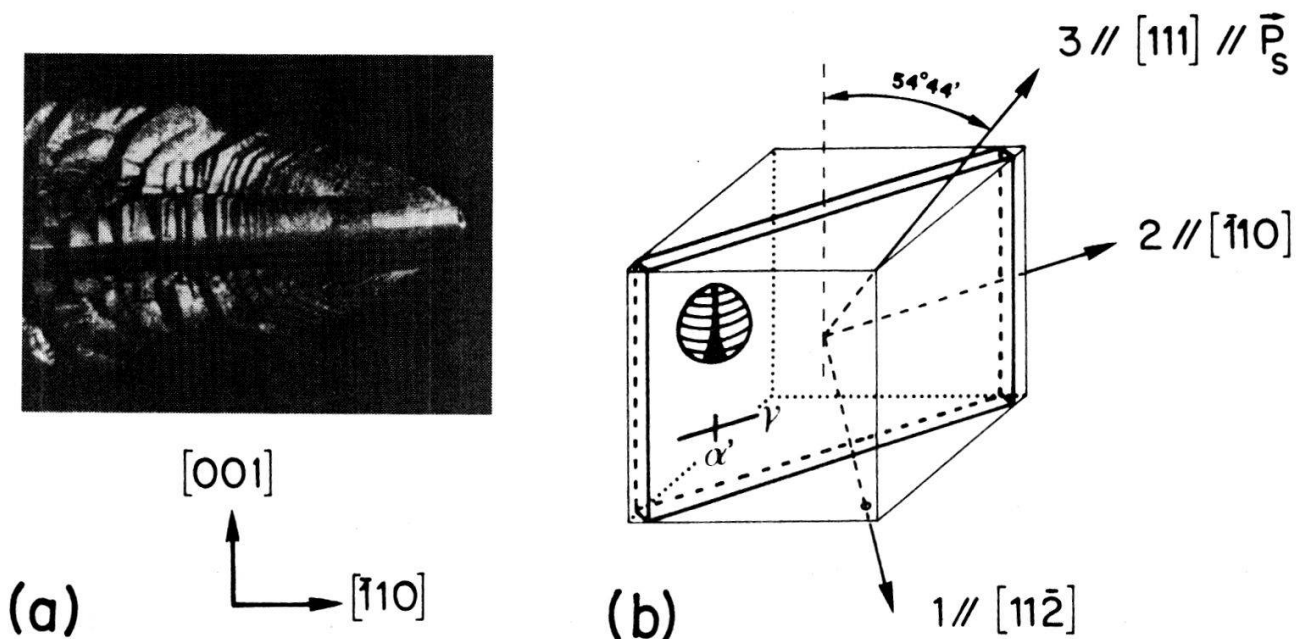
Die Frage der elektrischen Ordnung war sehr umstritten bis Teague et al. 1970 einen Hysteresesyklus (gemessen bei ≈ 80 K) publizierten [7]. Chemisches Ätzen erlaubt unter dem optischen Polarisationsmikroskop ferroelastische Eindomänen in ferroelektrische 180°-Domänen aufzulösen [8] und dadurch die von neuem angezeifelte Existenz von Ferroelektrizität bei Raumtemperatur

[9] eindeutig zu beweisen.

Verschiedene Aspekte des Aetzreliefs werden aufgezeigt und analysiert; mögliche Polarisationskonfigurationen an den Schnittstellen ferroelastischer Domänen werden diskutiert.

2. Experimenteller Teil

Dendritische BiFeO_3 -Einkristalle wurden durch Lösungszucht aus einem Bi_2O_3 -Fluss mit 23 Molprozent Fe_2O_3 gewonnen [8]. Der einphasige Zustand der Kristalle wurde mit einer Guinier-Aufnahme überprüft. Die einzelnen Dendriten sind sehr flach (Fig. 1a) und zeigen einen ellipsenähnlichen Querschnitt. Für die durch das Wachstum bedingte dominierende Orientierung der ferroelastischen Domänen ist die optische Achse (und somit die dazu parallele spontane Polarisation) um $54^\circ 44'$ aus der grösseren Dendritenhauptebeine (110) herausgedreht (Fig. 1). Dementsprechend wurde das in Figur 1 gezeigte Koordinatensystem gewählt. Die kristallographischen Indices sind pseudokubisch zu verstehen.



Figur 1 : Verwendetes pseudokubisches Koordinatensystem ;
Orientierung der Proben

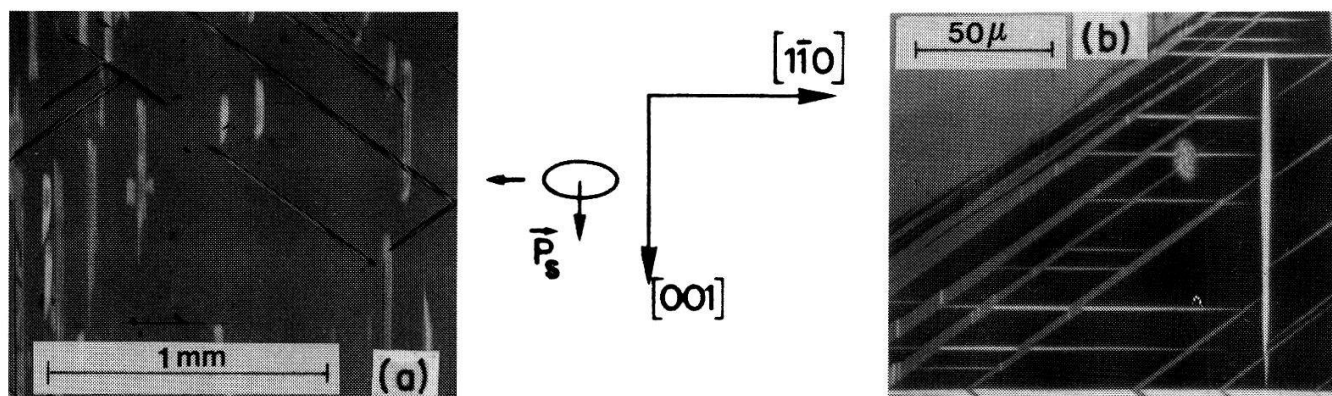
Die Dendriten wurden mit Hilfe der Laue-Methode genau orientiert (besser als 0.5°) und nachfolgend planparallel auf eine Dicke von $20\ \mu\text{m}$ bis $500\ \mu\text{m}$ abgeschliffen und poliert. Nach einer

ersten optischen Analyse unter dem Polarisationsmikroskop wurden die Proben während 2 min. in einer 50% HCl/H₂O-Lösung geätzt. Aspekte des resultierenden Oberflächenreliefs werden in dieser Arbeit diskutiert.

3. Resultate und Diskussion

Die in polierten Proben beobachteten Konfigurationen ferroelastischer Domänen werden unter dem optischen Mikroskop mit gekreuzten Polarisatoren analysiert. Die Orientierungen der verschiedenen Domänen, sowie die Winkel zwischen deren Auslöschung erlauben keine endgültige Festsetzung der Richtung der spontanen Polarisation der einzelnen Domänen.

In dünnen Proben (dünner als 50 μm für BiFeO₃) können im Durchlicht die Domänenwandneigungen gegenüber der Schliffebene, sowie die Achsenorientierung der dominierenden spontanen Polarisation (Konoskopie) erfasst werden. Figur 2a zeigt einen (110)-Schnitt mit um 45° geneigten (100)-Wänden und um 54°44' geneigten (011)- und (0 $\bar{1}$ 1)-Wänden. Die Orientierung der geneigten (54°44') dominierenden spontanen Polarisation $\vec{P}_S$ ist ebenfalls eingetragen.



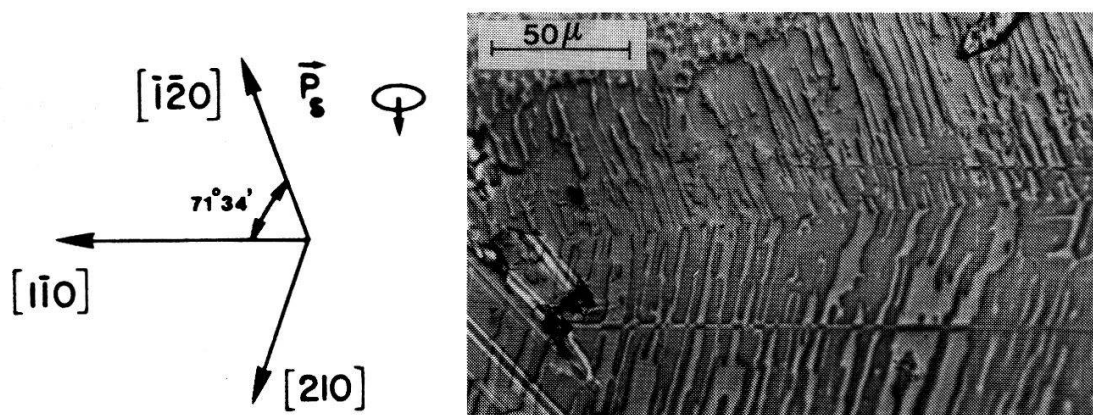
Figur 2 : Zwei parallel zur (110)-Ebene geschliffene Proben
 (a) : Durchlicht, Probendicke $\approx 25 \mu\text{m}$
 (b) : Auflicht, Probendicke $\approx 500 \mu\text{m}$

Diese Informationen sind hingegen nicht zugänglich bei dickeren Proben, die nur im reflektierten Licht beobachtet werden können (Fig. 2b). Im polarisierten Auflicht erhält man dank der starken optischen Anisotropie [1,8] ausgeprägten Kontrast zwischen

den Domänen mit Polarisation in der Schliffebene (110) ($\vec{P}_S // \pm[\bar{1}11]$ und $\pm[1\bar{1}1]$) und jenen, deren Polarisation zur Schliffebene geneigt liegt ($\vec{P}_S // \pm[111]$ und $\pm[\bar{1}\bar{1}1]$). Die erste Kategorie zeichnet sich durch starken Schwarz/Weiss-Kontrast zwischen den Auslöschungs- und 45°-Stellungen aus. Die zweite Kategorie wird in 45°-Stellung lediglich grau und in 0°-Stellung nicht ganz schwarz. Dank verschiedener Auslöschungsrichtung lassen sich die $\pm[\bar{1}11]$ von den $\pm[1\bar{1}1]$ Orientierungen von $\vec{P}_S$ leicht unterscheiden. Während sich die $\pm[111]$ von den $\pm[\bar{1}\bar{1}1]$ Orientierungen in Transmission sowohl orthoskopisch (durch Kippen um die $[1\bar{1}0]$ -Richtung) als auch konoskopisch gut unterscheiden lassen [8], ist dies in Reflexion nicht der Fall.

Dünne geätzte Proben zeigen im Durchlicht an den planparallelen Probenoberflächen komplementäre, der Polarisation entlang verschobene Aetzfiguren ferroelektrischer 180°-Domänen. Die Seitenflächen der gebildeten Oberflächenstufen laufen ebenfalls immer parallel zur Polarisation. Die 180°-Domänenwände enthalten demzufolge die entsprechende lokale Polarisationsorientierung und der Aetzvorgang geht vorzugsweise entlang dieser Orientierung vor sich.

Figur 3 zeigt das Aetzrelief eines sehr dünnen ($\approx 10 \mu\text{m}$) (001)-Schnittes im Durchlicht; die Aetzfiguren der oberen und unteren Fläche fallen hier praktisch zusammen. Die Spuren von 180°-Domänenwänden sind preferentiell nach $\langle 120 \rangle$ Orientierungen

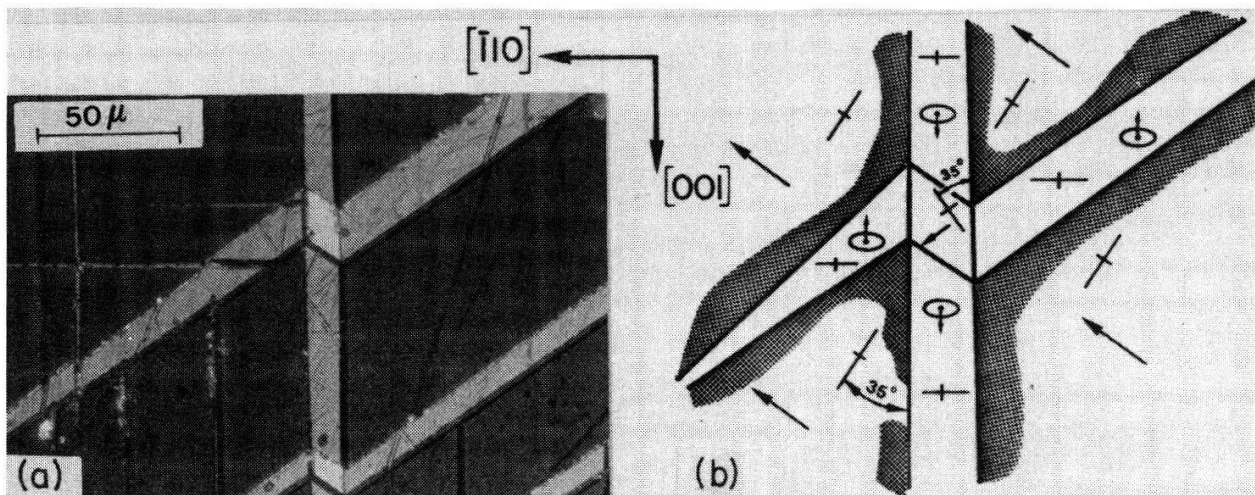


Figur 3 : Aetzrelief eines (001)-Schnittes im Durchlicht mit vorzugsweiser Ausrichtung der 180°-Domänenwandspuren nach $[\bar{1}20]$ und $[210]$

ausgerichtet. In (110)-Schnitten sind die Vorzugsorientierungen der 180° -Domänenwandspuren ungefähr entlang $\langle 113 \rangle$ Richtungen. Diese Vorzugsorientierungen scheinen darauf hinzuweisen, dass die ferroelektrischen 180° -Domänenwände vorwiegend $\{112\}$ -Ebenen sind. Die Aetzfiguren zeigen aber auch gleichzeitig willkürliche Formen nicht rationaler Domänenwandebenen, die nichtsdestoweniger die Polarisationsorientierung enthalten.

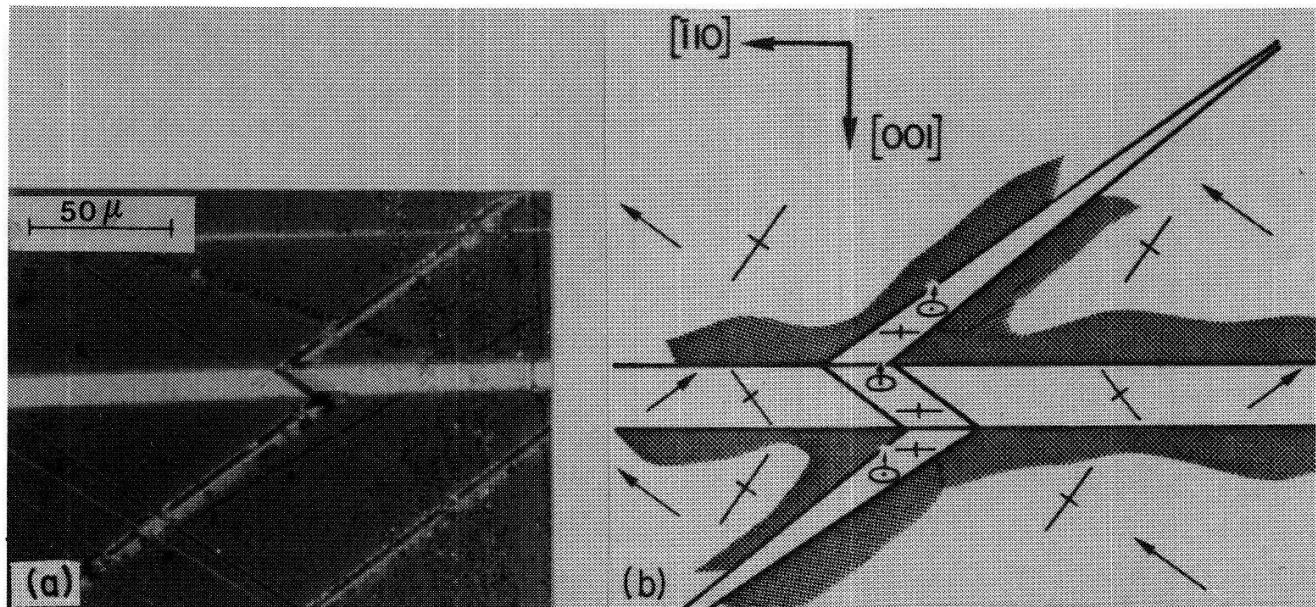
In Figur 3 sind die ferroelektrischen 180° -Domänen von zwei schmalen ferroelastischen Domänen ("Spikes") mit Spuren parallel $[1\bar{1}0]$ durchstossen. Die damit verbundene lokale Reliefinversion entlang dieser "Spikes" lässt auf bevorzugte Kopf-Schwanz Anordnung der Polarisation verschieden orientierter benachbarter Domänen schliessen.

Im Auflicht betrachtete Schnittstellen geätzter ferroelastischer Domänen sind in den Figuren 4a und 5a wiedergegeben. Die optischen Kontraste lassen sich problemlos durch Kopf-Schwanz Anordnung der Polarisation verschieden orientierter benachbarter Domänen beschreiben (Fig. 4b und 5b).



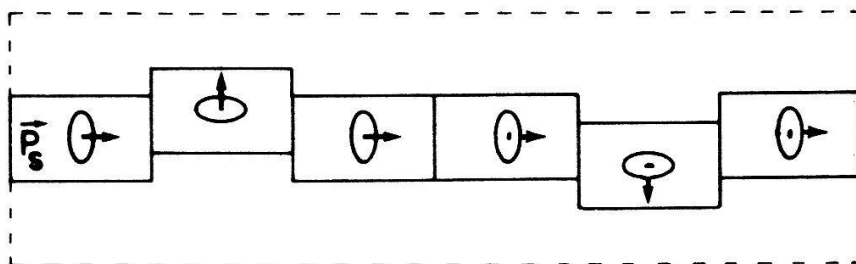
Figur 4 : Schnittstelle ferroelastischer Domänen,
Zentralelement mit $\vec{P}_S$ in der Schliffebene
(a) Beobachtung im Auflicht
(b) Analyse der Polarisationskonfiguration

Die verschiedenen Aetzreliefs wurden ebenfalls im Rasterelektronenmikroskop betrachtet, um überhöhte und abgetiefte Partien des Reliefs eindeutig zu identifizieren. Es zeigt sich, dass aus



Figur 5 : Schnittstelle ferroelastischer Domänen,
Zentralelement mit zur Schliffebene geneigter
Polarisation $\vec{P}_S$
(a) Beobachtung im Auflicht
(b) Analyse der Polarisationskonfiguration

der Schnittebene aus- und eintretende Dipolenden stärker bzw. schwächer geätzt werden als Domänen mit $\vec{P}_S$ in der Schliffebene (Fig. 6, Vorzeichen noch nicht bekannt).



Figur 6 : Schematische Darstellung eines Ätzreliefs

4. Schlussfolgerung

Sowohl die in ferroelastischen Eindomänen beobachteten ferroelektrischen 180° -Domänen als auch die Kopf-Schwanz Anordnung der Polarisation verschieden orientierter benachbarter Domänen lässt darauf schliessen, dass diese Domänen nicht wachstumsbe-

dingt sind, sondern sich wahrscheinlich erst beim Abkühlen infolge der Zunahme des elektrischen Widerstandes gebildet haben, um elektrostatische Energie abzubauen.

5. Anerkennungen

Die Autoren danken Herrn R. Cros für die Anfertigung von Proben und Zeichnungen, Herrn J. Wüst (Musée d'Histoire Naturelle, Genève) für die Beobachtungen am Rasterelektronenmikroskop und dem Schweizerischen Nationalfonds für finanzielle Unterstützung (Projekt No 2.643-0.85)

6. Referenzen

- [1] C. Tabares-Muñoz, J.-P. Rivera und H. Schmid, *Ferroelectrics* 55, (1984), 235.
- [2] P. Fischer, M. Polomska, I. Sosnowska und M. Szymański, *J. Phys. C : Solid State Phys.* 13, (1980), 1931.
- [3] J.-M. Moreau, C. Michel, R. Gerson und W. J. James, *J. Phys. Chem. Solids* 32, (1971), 1315.
- [4] C. Tabares-Muñoz, J.-P. Rivera, A. Bezinges, A. Monnier und H. Schmid, *Proc. 6th Int. Meeting on Ferroelectricity, Kobe 1985*, *Jpn. J. Appl. Phys.* 24, (1985), Suppl. 24-2, 1051.
- [5] A. I. Zaslavski und A. G. Tutov, *Sov. Phys. Doklady* 135, (1960), 1257.
- [6] J.-M. Moreau, C. Michel, R. Gerson, und W. J. James, *Acta Cryst.* B26, (1970), 1425.
- [7] J. R. Teague, R. Gerson und W. J. James, *Solid State Commun.* 8, (1970), 1073.
- [8] C. Tabares-Muñoz, *Ph. D. Thesis*, No 2191, Université de Genève (1986).
- [9] I. H. Ismailzade, R. M. Ismailov, A. I. Alekberov und F. M. Salaev, *Phys. Stat. Solidi* A66, (1981), 119.



FAR INFRARED PROPERTIES AND ELECTRONIC STRUCTURE OF TmSe

F. Marabelli and P. Wachter

Laboratorium für Festkörperphysik, ETH-Hönggerberg, 8093 Zürich, Switzerland

Abstract : We made new reflectivity measurement on a single crystal of TmSe in the far-infrared between 3.5 K and 300 K. At room temperature our results agreed with the old data of Batlogg. A. Kramers-Kronig transformation permitted us to derive the dielectric constants. At low temperature our results show that TmSe has the Fermi level in a pseudo-gap of a few meV. The hybridization model provides a general electronic structure for the intermediate valent materials: Two density of states peaks caused by hybridization and a gap in between. Transitions between these peaks are possible, which we have measured.

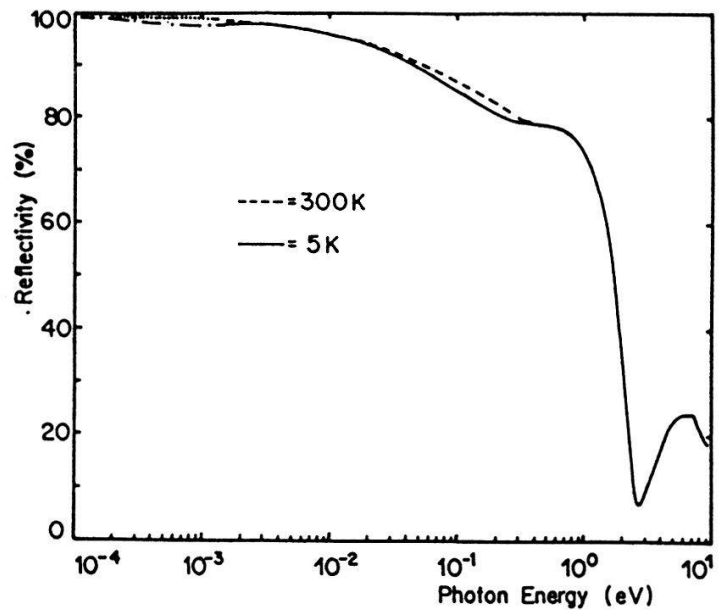
INTRODUCTION

TmSe is an intermediate valent material which has been much studied in the last ten years. Reflectivity measurements have been done by Ward et al. in 1975 ⁽¹⁾ and, with varying degrees of valence mixing, by Batlogg in 1979 ⁽²⁾. We performed new reflectivity measurements in the photon energy range from 1meV up to 0.5eV at room temperature and at low temperature. The aim was to study the electronic transitions in the vicinity of the Fermi level.

EXPERIMENTAL RESULTS

At 300^oK our data agreed fairly well with the data of Batlogg. A measurement performed for energies from 8 up to 100cm⁻¹ at the temperature of 3.5^oK didn't present any substancial difference in comparison with the measurement obtained at 5^oK. Whether high or low temperature reflectivity joint the data of Batlogg at the energy of 0.5eV. We assume in our analysis that for energies greater than 0.5eV the reflectivity spectrum is not affected by varying temperature. We therefore extended our spectra up to 12eV by using the data of Batlogg.

Fig. 1 : Near normal incidence reflectivity of TmSe at 5 K and at 300 K.



DISCUSSION

Below 1 meV the reflectivity has been extrapolated to be compatible with the measured dc conductivity. At 300°K the Hagens-Rubens relation fitted very well the experimental points, whereas at low temperature the extrapolation has been performed in a different, more complex way. We introduced a Drude term related to the dc. conductivity and we assumed that at energies lower than KT (with $T=3.5^\circ\text{K}$, $h\omega < 0.3\text{meV}$) all other electronic interband transitions are extinguished. Then we adopted a self consistent fit procedure similar to that used for UPt_3 ⁽³⁾. From the self consistent fit we obtained a value for the plasma frequency of the free carriers $\omega_p = 0.105\text{eV}$. The analysis of the dependence of ω_p on the number of carriers and on their effective mass, in connection with the γ coefficient of the specific heat, gave us an upper limit for these two quantities. By using the value reported by Berton et al.⁽⁴⁾ $\gamma = 350\text{mJ/molK}^{-2}$ we obtained an effective mass $m^* = 350m(+50)$ for a number of carriers 0.13 el/form. unit.

Kramers Kronig transformation allows us to analyse our spectrum in term of dielectric constant and optical conductivity. Regarding the optical conductivity we observe a minimum at 2.6eV, above which high energy interband transitions start. Below this minimum, at room temperature the predominant contribution to the conductivity is due to free carriers, but there are some deviations from a simple Drude behavior. A relatively strong maximum appears at 7meV. At 3.5–5°K the spectrum shows two peaks, one at 0.3eV, the other very sharp at 3meV. Below 2meV the optical conductivity decreases very rapidly to the statical value

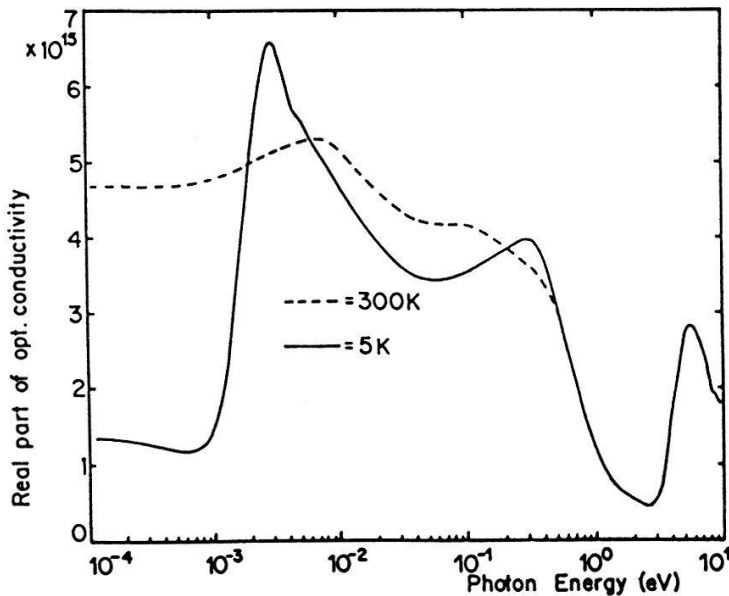


Fig. 2 : Real part of the optical conductivity of TmSe at 5 K and at 300 K.

$\sigma_{dc} = 1.37 \times 10^{15}$ Hz. Similar spectra have been found for other compounds like SmS and SmB₆ (5,6). For these compounds a f-d hybridization model has been used to explain the structures. In this scheme we ascribe the first peak to f-f transitions, whereas the second is due to f-d transitions. A fit performed with Lorentzian oscillators confirm this picture. We obtained for the f-f transition across the gap of 3 meV a band width of about 3.5 meV with an oscillator strength very small ($f \approx 0.025$) and a very large value for the JDOS of about 2'500 states/ryd. cell. An additional structure can be found at low temperature which corresponds to the maximum at 7 meV at room temperature. It could be explained in term of resonant scattering coupled with phonons as argued for CePd₃ by Pinkerton et al. (7).

REFERENCES

- 1) R.W. Ward, B.P. Clayman and T.M. Rice Sol. St. Comm. 17, 1297 (1975)
- 2) B. Batlogg Phys Rev B 23, 1827 (1981)
- 3) F. Marabelli, G. Travaglini, P. Wachter, J.J.M. Franse, Sol. St. Comm. 59, 381 (1986)
- 4) A. Berton, J. Chaussy, B. Cornut, J. Flouquet, J. Odin, J. Peyrard, F. Holtzberg, Phys. Rev. B 23, 3504 (1981)
- 5) G. Travaglini and P. Wachter Phys. Rev. B 30, 5877 (1984)
- 6) G. Travaglini and P. Wachter Phys. Rev. B 29, 893 (1984)
- 7) F.E. Pinkerton, B.C. Webb, A.J. Sievers, J.W. Wilkins, L.J. Sham, Phys. Rev. B. 30, 3068 (1984)

Lochbrenn-Spektroskopie als Werkzeug zur Eliminierung inhomogener Verbreiterung

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

Lumineszenzspektren von Molekülen in Glas-Matrizen sind immer stark inhomogen verbreitert.

Photophysikalisches Lochbrennen kann als Werkzeug benutzt werden, um diese inhomogene Verbreiterung zu eliminieren. Damit lässt sich die korrekte Form der Phononenseitenbande bestimmen und die Kopplung der Farbstoffmoleküle mit der Glasmatrix studieren.

Phonon frequencies and line widths at valence fluctuations : a simple vibronic model

G. Solt and H. Beck
Institut de Physique, Université de Neuchâtel, 2000 Neuchâtel

The observed softness and line broadening of the zone boundary (L) optical phonon in compounds like $\text{Sm}_{0.75}\text{Y}_{0.25}\text{S}$ is related to the easily induced valence fluctuation at the rare earth ion. This phenomenon can simply be demonstrated by a vibronic model^{1,2}, in which the compressed Sm ion transfers its loosely bound f-electron directly to its decompressed neighbour, in the rhythm of the LO lattice vibration. Analytical and numerical results for the phonon response at different temperatures of this system are presented.

1, A.C. Hewson and D.M. Newns, J. Phys. C : Sol. St. Phys. 13, 4477, 1980

2, P. Prelovsek, J. Phys. C : Sol. St. Phys. 12, 1855, 1979

Magnetismus

Magnetische Anregungen in den eindimensionalen magnetischen Verbindungen $\text{CsMn}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Br}_3$

O. Paul und A. Furrer, Labor für Neutronenstreuung, ETH Zürich, H.U. Güdel, Institut für anorganische Chemie, Universität Bern.

Mittels inelastischer Neutronenstreuung wurden die magnetischen Anregungen an Einkristallen der eindimensionalen magnetischen Verbindungen $\text{CsMn}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Br}_3$ ($x=0.98, 0.95, 0.90, 0.75, 0.50$) untersucht. Mittels kritischer Neutronenstreuung wurden die Korrelationslängen der Mn-Ketten bestimmt. Es wird gezeigt, dass mit zunehmender Mg-Konzentration das kollektive magnetische Verhalten der Verbindungen in ein lokales magnetisches Verhalten mit diskreten Clusteranregungen übergeht. Die Resultate werden auf der Basis von Spinkorrelationsfunktionen diskutiert.

Bestimmung von Konzentrationsprofilen in zweiphasigen Legierungen aus dem magnetischen Anteil der Neutronenkleinwinkelstreuung

G. Kostorz, A. Cerri, P.P. Müller, B. Schönfeld und A.F. Wright¹
Institut für Angewandte Physik, ETH-Hönggerberg, 8093 Zürich

¹Institut Laue-Langevin, F-38042 Grenoble

Die Neutronenkleinwinkelstreuung einer binären ferromagnetischen Legierung, die nichtmagnetische Ausscheidungen enthält, wird für den Fall von Konzentrationsgradienten in der Umgebung der Ausscheidungen bei stark konzentrationsabhängiger Curie-Temperatur diskutiert. Aus dem magnetischen Anteil der Streuung als Funktion der Temperatur lässt sich der Verlauf der Konzentration in der Matrix im Nanometerbereich verfolgen. Erste Messungen für eine Ni-Al-Legierung werden vorgestellt.

ESR Study on Doped Polythiophene

M. Schärli, G. Harbeke and H. Kiess

Laboratories RCA Ltd., Badenerstrasse 569, 8048 Zürich

K.A. Müller and W. Berlinger

IBM Zurich Research Laboratory, Säumerstr. 4, 8803 Rüschlikon

We have investigated the spin concentration of poly(3-methylthiophene), doped electrochemically with BF_4^- . Up to a doping level of $y \approx 10$ mol % the spin concentration increases approximately linearly by 0.5 - 1 spins per injected charge. The intensity and the linewidth ΔH vary less than by a factor of 2 for $y \geq 1$ mol % over a time period of some days. ΔH ranges from 0.8 Gauss up to about 8 Gauss. The large value of ΔH indicates near stationary charges. This may prevent the formation of bipolarons.

DESORDRE THERMIQUE ET FLUCTUATIONS MAGNETIQUES DANS LES ALLIAGES INVARS Fe-Ni.

G.-P. Renaud et S.-G. Steinemann

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

Dans les alliages du type Invar, le ferromagnétisme est très sensible aux changements de volume. Il en résulte que dans le domaine de Curie, les fluctuations thermiques induisent une localisation de l'aimantation. La distribution spatiale des aimantations est ainsi calculée de manière très simple dans le modèle du magnétisme itinérant en utilisant les valeur de $dT_c/d\ln V$. Nos résultats sont en accord avec les mesures des courbes d'aimantation et avec celles de la distribution des champs internes par l'effet Mössbauer.

Positronenspektroskopie

Fermi surfaces in TiBe_2 through positron annihilationT. Jarlborg, A.A. Manuel, M. Peter, A.K. Singh and E. Walker

Université de Genève, D.P.M.C. CH-1211 Genève 4

Z. Fisk and J.L. Smith

Los Alamos Nat. Lab., New Mexico 87545, USA

We present positron annihilation measurements performed on a single crystal of the nearly ferromagnetic Cl5 compound TiBe_2 . The two dimensional angular correlation distribution has been measured in the (211) plane. The data are analysed in the repeated zone scheme and compared with theoretical results obtained from a LMTO band structure calculation, taking account of the positron wave function. Using a back-projection technique, an attempt to reconstruct the Fermi surface from only one projection is done and compared with the theoretical surface.

Study of electron-positron correlation in 3d transition metals

A.K. Singh, P. Genoud, T. Jarlborg, A.A. Manuel, M. Peter and E. Walker

Université de Genève, D.P.M.C., CH-1211 Genève 4

Two-dimensional angular correlation of positron annihilation radiation measurements are analysed to investigate the nature of the many-body correlation effects. This is done by comparing experimental data with calculations performed in the independent particle approximation (IPA) using the linear muffin-tin orbital method. A phenomenological model is proposed to overcome the discrepancies between experiment and IPA calculations. According to this model, correlation effects are drastically different for d- and s- band electrons. For the d-band electrons lying near the Fermi energy, correlation tend to decrease the electron and positron wavefunction overlap. This model is applied to V, Cr and Ni.

Fermi surfaces in Nb_3Sn through positron annihilationL. Hoffmann, T. Jarlborg, A.A. Manuel, M. Peter, A.K. Singh and E. Walker

H. Takei and N. Toyota

Tohoku University, Sendai 980, Japan

In order to understand the high superconducting transition temperature in the Al5 structure compounds, we have performed two-dimensional positron annihilation measurements on a Nb_3Sn single crystal in the three symmetry directions (100), (110) and (210). The data are analysed in the repeated zone scheme and compared with theoretical results obtained from a LMTO band structure calculation. The theoretical Fermi surface is also compared with an experimental surface obtained by means of a back-projection technique.

Fermi surfaces in CeNi_5 through positron annihilation

T. Jarlborg, A.A. Manuel, M. Peter, A.K. Singh, J.L. Stephan and E. Walker
Université de Genève, D.P.M.C., CH-1211 Genève 4

W. Assmus and M. Hermann

Phys. Inst. der Goethe Universitaet, D-6000 Frankfurt am Main-1

We have measured the two dimensional angular correlation of the positron annihilation radiation in CeNi_5 single crystals. The two-photon momentum distribution has been obtained for the three crystallographic orientations. The Fermi surface topology has been investigated by reconstructing the 3D distribution from the 2D data using the filtered backprojection algorithm. The results are compared with those obtained by calculating the band structure using the Linear Muffin Tin Orbital method and local density potential, with the Ce f-electrons treated as valence electrons.

Magnetismus

Magnetoelectric effect $(ME)_H$ in the perovskites Pb_2CoWO_6
and Pb_2FeTaO_6

W. Brixel, A. Steiner, J.-P. Rivera and H. Schmid

Département de chimie minérale, analytique et appliquée, Université de Genève, 30, quai Ernest Ansermet, CH-1211 Genève 4

In the ferromagnetic/ferroelectric/ferroelastic low temperature phase of the ordered perovskite Pb_2CoWO_6 a linear $(ME)_H$ -effect has been measured from 4,2 K up to $T_C = 7,6$ K and a quadratic one above T_C . This is the first example of a linear ME_H -effect evidenced in a ferroelectric/ferromagnetic/ferroelastic perovskite. In the rhombohedral ferroelectric/antiferromagnetic/ferroelastic phase of the disordered perovskite Pb_2FeTaO_6 the quadratic $(ME)_H$ coefficients β_{111} , β_{113} , β_{311} , and β_{333} have been determined at 4,2 K. Samples used for measurements were flux grown polydomain single crystals.

Phasenübergänge

**SMALL ANGLE X-RAY SCATTERING FROM CRAZES CALCULATED BY COMPUTER
SIMULATION ***

A. Sbaï, H.H. Kausch, Laboratoire de Polymères - EPFL, CH-1007 Lausanne,
Switzerland

M. Dettenmaier, Max-Planck-Institut für Polymerforschung, D-6500 Mainz,
Germany

Abstract : The small angle X-ray scattering (SAXS) from craze fibrils was obtained by computer simulation in order to explain the SAXS features, in particular to relate the peak position to Bragg spacing and intrafibrillar correlation.

1. Introduction

Much attention has been focused on the fibrillar craze microstructure in order to understand basic craze mechanisms such as craze initiation, growth and breakdown (see e.g. ref. 1, 2). Scattering methods such as small angle X-ray [3-9] and small angle electron scattering [10] have proved to be very powerful tools for a quantitative analysis of the craze microstructure. This analysis is generally based on the assumption that crazes may be modeled by an array of cylindrical fibrils, all oriented perpendicular to the craze surfaces. Specific features of the resulting scattering peak have been used to obtain information on the craze microstructure. To examine the validity of this approach in more detail, scattering curves have been calculated by computer simulation with volume fraction of craze fibrils, the fibril diameter and the distribution in fibril diameter serving as parameters.

2. Theoretical outline

Our considerations are limited to coherent scattering only, and we assume that the fibrils behave as hard parallel cylinders, randomly distributed within the craze. First, we consider that all fibrils have the same diameter D . Assuming cylindrical symmetry, the smeared scattering intensity is given by :

$$I(s) = N f_D^2(s) S F(s) \quad (1)$$

* Presented at the Spring Meeting of Swiss Phys.Soc., Neuchâtel, April 11, '86,

where

$$f_D^2(s) = \Delta\rho^2 \left(\frac{DJ_1(sD/2)}{s} \right)^2 \quad (2)$$

is the form factor of a single fibril with $\Delta\rho$ the difference between local and average electron density in fibrils, $s = 4\pi\sin\theta/\lambda$ is the equatorial component of the scattering vector with λ the X-ray wavelength, θ being half the scattering angle, and J_1 is the first order Bessel-function.

$$SF(s) = 1 + (8v_f/\pi D^2) \int_0^\infty (g(x)-1)J_0(sx)xdx \quad (3)$$

is the structure factor of hard cylinders with v_f the volume fraction of fibrils within the craze and J_0 is the the zero order Bessel function. The function $g(x)$ is the radial distribution function (RDF) defined by

$$g(x) = (D^2/8Nv_fx) \left\langle \sum_{i \neq j} \delta(x-x_{ij}) \right\rangle_M \quad (4)$$

N being the number of fibrils and x_{ij} is the distance between centers of the i th and j th fibril. $\langle \rangle_M$ means the statistical average on M configurations.

The calculation of RDF is usually attempted by statistical approaches [11]. Several approximate theories, such as the Percus-Yevick (PY) and modified Born-Green-Yvon (BGYM) equation have been used for the hard-disc model [12]. The Monte-Carlo method, valid for ergodic systems, gives useful results for the evaluation of RDF [13]. Equation (3) and (4) give

$$SF(s) = 1 + \left\{ \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i \neq j} J_0(sx_{ij}) \right\rangle_M \right\} \quad (5)$$

Equation (5) contains two terms: the unity is the independent particle contribution and $\{...\}$ characterizes the interfibrillar correlation corresponding to Bragg spacing between fibril centers. The calculation of the second term consists of distributing N hard discs on a given surface, as shown in fig. 1, by choosing randomly the coordinates of the disc centers with the condition of impenetrability. This is not valid for high densities ($v_f > 50\%$). Moreover, additional computation time is necessary for high N ($N > 100$). The single fibril contribution, eq.(2), is obtained in a straightforward manner by evaluating the Bessel functions in integral representations. In the case of a size distribution in fibril diameter, the smeared scattering intensity becomes

$$I(s) = N \left\{ \langle f_D(s) \rangle_w^2 SF(s) + (\langle f_D^2(s) \rangle_w - \langle f_D(s) \rangle_w^2) \right\} \quad (6)$$

where $\langle \rangle_w$ denotes the averaging over $w(D)$, the size distribution func-

tion. It is recognized that the vast majority of dispersed systems tends to follow the log-normal law:

$$w(D) = (\sqrt{2\pi} \sigma D_m \exp(\sigma^2/2))^{-1} \exp[-(\ln D - \ln D_m)^2 / 2\sigma^2] \quad (7)$$

where D_m is the geometric mean diameter and σ being the standard deviation. Our purpose consists in computing eq.(6) at various σ , D_m held fixed and $SF(s)$ being the structure factor in the case of fibrils having the same diameter.

3. Results and discussion

Figure 1 illustrates a set of hard discs, randomly distributed, which represents a two-phase model (craze fibrils embedded in void matrix). The structure factor $SF(s)$, related to the RDF by Hankel transform (eq.(3)) of such a set was computed by means of eq.(5). The oscillations around unity are a consequence of the interference which occurs in the presence of interaction potentials. In our model only the impenetrability of the fibrils was assumed, hence the correlations are of short range, and one remarks that the oscillations disappear at large s (fig.2). The scattering intensity for the first case was evaluated at different v_f (fig. 3). The mean diameter was fixed at 37nm, the value obtained for crazes in polycarbonate in reference [3]. The scattering curves contain the interference peak which provides the quantitative information about the mean diameter, in case the volume fraction v_f is known, by using the modified Bragg law

$$s_{\max} D = c \sqrt{v_f} \quad (8)$$

where $s_{\max}$ is the position of peak and c is a constant characterizing the configuration of the lattice. Our calculations give $c = 0.941 \pm 0.05$, whereas, for a hexagonal lattice, Bragg's law gives $c = 1.212$. From Monte-Carlo calculations for hard cylinders $c = 1.16$ was obtained [4]. The difference comes from the fact that we have taken account of the single particle scattering which is ignored in the other two methods. In the case of size distribution eq.(6) was computed at different σ ; D and v_f were fixed. One can notice that the peak amplitude decreases as σ increases, moreover the curves become more scattered around $s_{\max}$ for a broad size distribution while the position of $s_{\max}$ is not affected. The behaviour of the simulated curves in the peak area is in good agreement with the experimental curve (fig. 4); the deviation at large s is mostly due to thermal motion and scattering air.

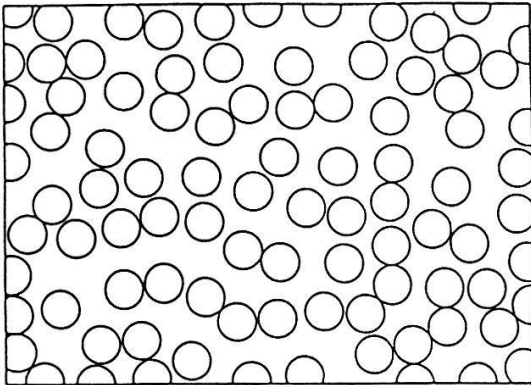


Fig.1: Configuration of randomly distributed hard-discs covering volume fraction of $v_f=50\%$

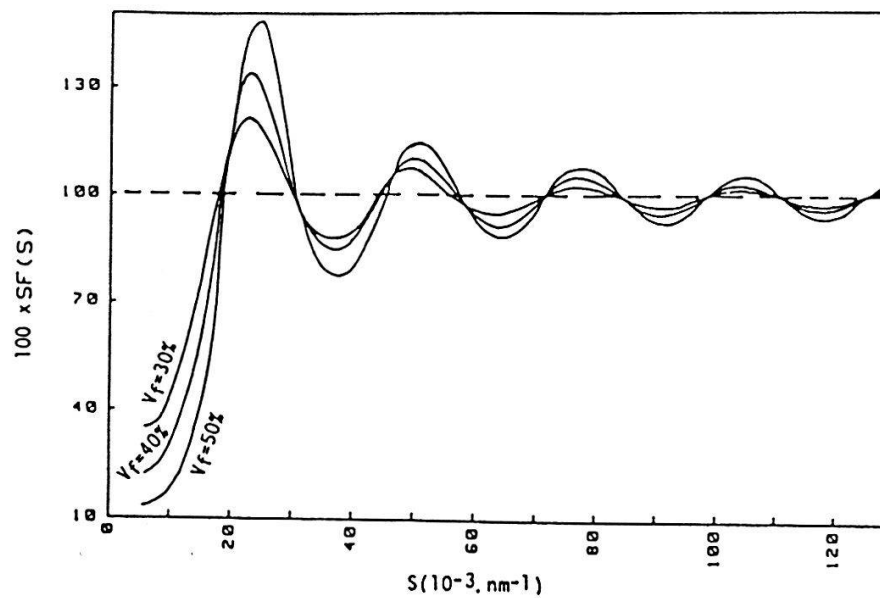


Fig.2: Structure factor SF vs s for hard-discs systems. $D = 37$ nm

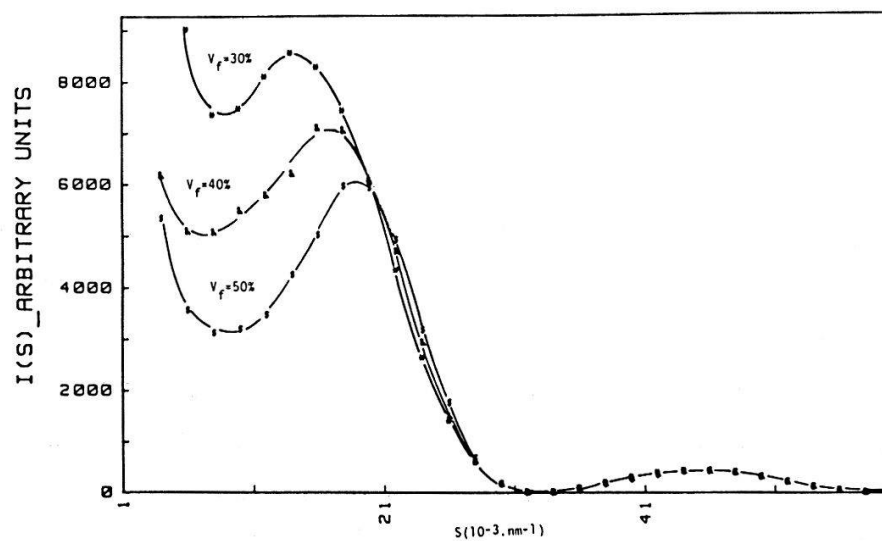


Fig.3: Computer generated scattering intensities I vs s . $D = 37$ nm

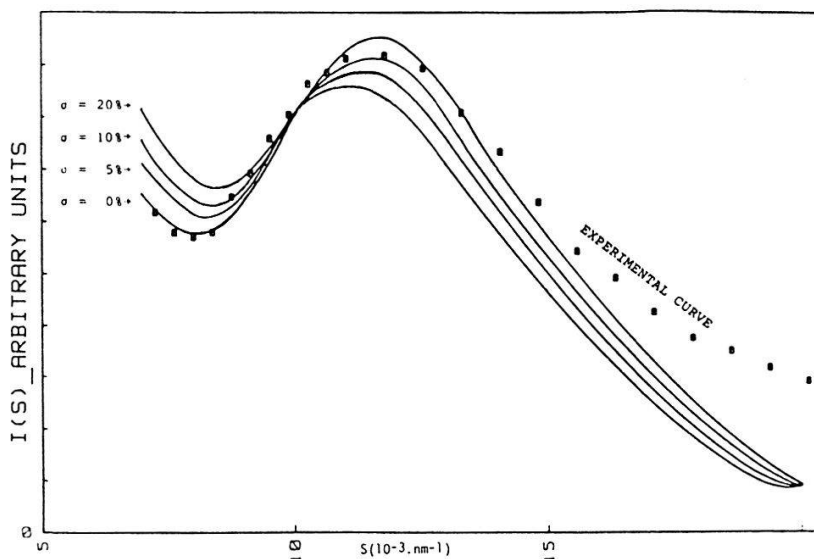


Fig.4: Comparison of scattering intensities, in case of size distribution, with experimental data. $D = 60$ nm.

Acknowledgements

The authors gratefully acknowledge the financial support of the Swiss National Science Foundation and also wish to thank the Electricity Department of EPFL for the free use of their VAX-Computer.

References

- [1] H.H. Kausch, "Polymer Fracture", 2nd edition, Berlin: Springer-Verlag 1986.
- [2] Advances in Polymer Science 52/53, H.H. Kausch (ed.), Berlin: Springer-Verlag 1983.
- [3] E. Paredes, E.W. Fischer, J. Macromol. Chem. 180, 2707 (1979).
- [4] H.R. Brown, E.J. Kramer, J. Macromol. Chem. B19, 487 (1981).
- [5] E. Paredes, E.W. Fischer, J. Polym. Sci.: Polym. Phys. Ed. 20, 929 (1982).
- [6] M. Dettenmaier, Adv. Polym. Sci. 52/53, H.H. Kausch (ed.) 57 (1983).
- [7] P.A. Westbrook, J.F. Fellers, R.W. Hendricks, J.L. Lin, J. Polym. Sci.: Polym. Phys. Ed. 21, 969 (1983).
- [8] P.A. Westbrook, J.F. Fellers, M. Cakmak, J.S. Lin, R.W. Hendricks, *ibid.*, 1913 (1983).
- [9] M.-Y. Tang, J.F. Fellers, J.S. Lin, J. Polym. Sci.: Polym. Phys. Ed., 22, 2215 (1984).
- [10] A., C.-M. Yang, E.J. Kramer, J. Polym. Sci.: Polym. Phys. Ed. 23, 1353 (1985).
- [11] J.A. Barker, D. Henderson, Rev. Mod. Phys. 48, 587 (1976).
- [12] F.H. Ree, Y.T. Lee, T. Ree, J. Chem. Phys. 55, 235 (1971).
- [13] W. Wood, J. Chem. Phys. 52, 729 (1970).

Caractérisation de la boracite $\text{Cu}_3\text{B}_7\text{O}_{13}\text{Br}$ G. Berset, M. Clin, J.-P. Rivera et H. SchmidChimie Appliquée, Université de Genève, 30, quai Ernest Ansermet,
CH-1211 Genève 4

La boracite Cu-Br subit une transition de phase structurale vers 235 K. Sa structure est cubique en dessus de cette température ($F\bar{4}3c - \bar{4}3m$), et orthorhombique en dessous ($Pca2_1 - mm2$). Une anomalie magnétique a pu être observée à partir d'environ 43 K, la boracite devenant un ferromagnétique faible. Des mesures de polarisation spontanée, de constante diélectrique (ϵ_{33}) et de biréfringence entre 12 K et 293 K ont permis de mettre en évidence ces deux transitions et sont présentées.

TEILCHEN-, ASTRO-, KERNPHYSIK

THE PION-NUCLEUS INTERACTION AT LOW ENERGY:
AN ALTERNATIVE APPROACH

H.J. Leisi, J.-F. Gilot, P.F.A. Goudsmit, B. Jeckelmann and S. Thomann,
Institute for Intermediate Energy Physics (IMP), ETH-Zurich, c/o SIN,
CH-5234 Villigen, Switzerland

Analysing pionic atom data we have shown that the usual optical model description of the pion-nucleus interaction leads to an inconsistency: The interaction must be treated relativistically [1]. There is an alternative, relativistic approach to the low-energy pion-nucleus interaction proposed by Birbrair et al. [2].

We have extended our pionic-atom analysis by including the spin non-zero cases (${}^6\text{Li}$, ${}^{10}\text{B}$, ${}^{14}\text{N}$) in our sample of isospin zero ($N=Z$) nuclei. The finite-range effect discovered in ref. 1 is confirmed. For ${}^6\text{Li}$ the parameter $\text{Re}\overline{B}_0$ of the quadratic term of the local s-wave potential, however, deviates from the value deduced from the other isotopes. This indicates that the s-wave repulsion may not be described by a quadratic term alone which is compatible with the Birbrair model. We are presently engaged in a more detailed study of the s-wave repulsion.

- [1] K.L. Giovanetti et al., "The isoscalar pion-nucleus interaction from pionic atoms", submitted to Physical Review Letters.
- [2] B.L. Birbrair et al., J. Phys. G: Nucl. Phys. 11, 471 (1985).

Preliminary Results from Experiment UA-6 on the Inclusive Production of π^0 , η , γ and J/ψ in $p\bar{p}$ and $p p$ Interactions at $\sqrt{s} = 24.3$ GeV.

A. Bernasconi et al.

presented by F. Gaille, Institut de Physique Nucléaire, 1015 Lausanne.

The UA-6 experiment uses an internal hydrogen gas jet target in the CERN SPS collider to study and compare processes from $p\bar{p}$ and $p p$ collisions. The hard scattering processes are production of π^0 , η and Direct Photons up to $p_T \sim 7$ GeV/c and production of $\gamma\gamma$ and e^+e^- pairs in the mass interval $2 < m < 7$ GeV/c².

After an introduction, a brief description of the apparatus as well as the main features of the devices are given. The electromagnetic calorimeter is described in more details.

The analysis we report on concerns the three data-taking periods UA-6 has had so far: a short $p\bar{p}$ run in 1984 yielding an integrated luminosity of 43 nb⁻¹ (fully analyzed), a second $p\bar{p}$ run in 1985 with 1000 nb⁻¹ (half analyzed), and, after rotating the experiment, a $p p$ run in 1986 resulting in 1600 nb⁻¹ (partially analyzed).

The invariant differential cross-section for inclusive π^0 production in $p\bar{p}$ collisions is shown as a function of p_T , in the $2.5 < p_T < 6.5$ GeV/c range. The cross section is then compared to $p p$ results at $\sqrt{s} = 23.7$ GeV from the CERN NA24 collaboration. No significant difference is observed. To compare with our own data, the ratio of π^0 production in $p\bar{p}$ over $p p$ is plotted versus p_T . The ratio is independent of p_T and not significantly different from 1.0. We also show the ratio of η over π^0 production as a function of p_T . For both $p\bar{p}$ and $p p$ interactions, the ratio is independent of p_T and ranges between 0.4 to 0.5.

The study of Direct Photons production in $p\bar{p}$ and $p p$ interactions could bring valuable information on the relative

contribution of $q \bar{q}$ annihilation over gluon Compton scattering. The ratio of Direct Photons over π^0 production is reported as a function of p_T as well as the Monte Carlo simulated background on single photons due to π^0 and η decays. In both $p \bar{p}$ and $p p$ interactions, an excess of Direct Photons above the background is clearly observed, thus pointing to the existence of a Direct Photon signal. Full analysis is needed to make a clear $p \bar{p}/p p$ comparison.

Finally, the e^+e^- invariant mass distribution in $p \bar{p}$ interaction is shown. Centered around $3 \text{ GeV}/c^2$, a distinct peak of events is observed. A Gaussian fit to the peak gives a mean of $3069 \pm 15 \text{ MeV}/c^2$, indicating clearly the presence of the J/ψ signal.

**TRITIUM BREEDING MEASUREMENT IN FUSION BLANKETS
USING THERMOLUMINESCENT DOSIMETERS**

Saber AZAM Institut de Génie Atomique (IGA)
Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL)

Abdulali GUERID Institut de Radiophysique Appliquée (IRA)
Service de la Santé Publique - Canton de Vaud

Abstract

The feasibility of thermoluminescent dosimetry method for tritium production measurement, in fusion blankets, is studied. The calibration of this method is discussed and some experimental results are presented.

I. Introduction

Tritium production forms an important aspect of the fusion energy program. In a D-T reactor, it is foreseen to generate tritium for refueling, by surrounding the reactor with a blanket structure containing lithium in some form.

Two types of fusion blankets have so far been studied since LOTUS is operational. Li_2CO_3 and Li_2O have respectively been used as the main tritium breeding material [1,2].

Liquid scintillation and thermoluminescent dosimetry methods are being used to measure the tritium production in the blankets. The feasibility of the first method has already been discussed earlier [3,4].

Thermoluminescent dosimeters (Harshaw TLD-100, TLD-600 and TLD-700) constitute the main element of the second method because they are composed of lithium (respectively with ^6Li enrichments of 7.5, 95.6 and 0.01%) and fluorine. The accumulated dose in a TLD could either be determined immediatly after irradiation to neutrons or by the self-irradiation of the subsequent beta decay of the tritium produced in it after an annealing process. Indirect reading* (self-irradiation) has been used. Determination of several calibration factors (correction, linearity and energy factors) is much easier and the contribution of side reactions mainly $\text{Li}^6(\text{n,p})\text{He}^6$, $\text{F}^{19}(\text{n,p})\text{O}^{19}$, $\text{F}^{19}(\text{n},\alpha)\text{N}^{16}$ and $\text{F}^{19}(\text{n},2\text{n})\text{F}^{18}$ are reduced to a great extent by the annealing process before the TLD is self-irradiated.

II. Dose evaluation of an irradiated TLD crystal

The response of a TLD crystal is very sensitive with respect to thermal treatment, handling and calibration procedure. The dose accumulated, after a time (t), in a TLD which is exposed to directly or indirectly ionising radiation is evaluated as follows:

$$D = Q \cdot f_{\text{cal}} \cdot f_{\text{cor}} \cdot f_{\text{E}} \cdot f_{\text{lin}}$$

where

- Q : Output signal in (nCoul)
- f_{cal} : Calibration factor in (rad/nCoul)
- f_{cor} : Overall correction factor
- f_{E} : Incident radiation energy factor
- f_{lin} : Linearity factor

*The TLD is annealed at 400°C. After measuring the total background, it is kept for a long period in a least exposed area before the reading process

II.1 Output signal (Q)

Thermal energy must be provided to an irradiated TLD crystal to release trapped electrons. The electrons then combine with the released holes producing optical radiation which is measured by a TLD integrating reading instrument. (Q) is the output signal delivered by this instrument.

II.2 Calibration factor (f_{cal})

This factor takes into account the TLD sensitivity which is related to changes in its physical state (trap distribution). It is determined, immediately after each reading by exposing the TLD to well known Co^{60} gamma field. (f_{cal}) is the ratio of the known Co^{60} dose to the reader's output (Q).

II.3 Correction factor (f_{cor})

This factor takes into account the fading phenomenon and the eventual changes during a thermal treatment in a TLD. Reference crystals are subjected to the same treatments as those used for the experiment. Any correction applicable to the reference crystals is then applied to the whole lot.

$$f_{cor} = \frac{\text{Exposure dose of the reference TLDs}}{\text{Mean value of the measured dose by the same TLDs}}$$

II.4 Incident radiation energy factor (f_E)

This factor takes into account the fact that the TLD is used in a radiation field different from the calibration one (Co^{60}). It is defined as follows:

$$f_E = \frac{\text{Irradiation dose of energy E}}{\text{Measured dose (evaluated with } Co^{60} \text{)}}$$

In the case of direct reading, the value of the numerator is very difficult to determine because TLDs are irradiated by neutrons, gammas and eventually charged particules of different energies (resulting from neutron interactions with the surrounding materials).

In the case of an indirect reading, the problem is easier due to the annealing process. Not having a β source equivalent to tritium, we have therefore simulated the self-irradiation of a TLD by irradiating it with x-rays of 22 KeV. This simulation has the advantage of producing homogeneous irradiation in the TLD. Tables 1 and 2 summarise the determination of (f_{cor}) and (f_E):

Table 1

Sample	Exposure dose [rad] of reference TLDs	Measured dose [rad] reference TLDs D_i	f_{cor}
TLD-600-1	10.05	9.93	$D = \frac{\sum D_i}{n} = 9.91 \pm 0.6\%$ $f_{\text{cor}} = \frac{10.05}{9.91}$ $= 1.014$
TLD-600-2	10.05	9.85	
TLD-600-3	10.05	9.96	
TLD-700-1	10.05	10.02	$D = 10.07 \pm 1.3\%$ $f_{\text{cor}} \approx 1.00$
TLD-700-2	10.05	10.23	
TLD-700-3	10.05	9.93	
TLD-700-4	10.05	10.10	
TLD-100-1	10.05	9.83	$D = 9.78 \pm 0.7\%$ $f_{\text{cor}} = 1.028$
TLD-100-2	10.05	9.73	

Table 2

Sample	Irradiation X-ray dose [rad]	Measured dose [rad]	Dose Mean Values [rad]	f_{cor}	f_E
			Irradia. Measured		
TLD-600-1	9.98	13.86	$\begin{matrix} 9.99 & 13.77 \\ \pm 0.1\% & \pm 0.6\% \end{matrix}$	1.014	0.716
TLD-600-2	9.98	13.82			
TLD-600-3	10.00	13.72			
TLD-600-4	10.00	13.68			
TLD-700-1	9.98	14.01	$\begin{matrix} 9.99 & 13.91 \\ \pm 0.1\% & \pm 0.5\% \end{matrix}$	1.000	0.719
TLD-700-2	9.98	13.89			
TLD-700-3	10.00	13.88			
TLD-700-4	10.00	13.85			
TLD-100-1	9.94	12.65	$\begin{matrix} 9.93 & 12.48 \\ \pm 0.1\% & \pm 1.17\% \end{matrix}$	1.028	0.774
TLD-100-2	9.94	12.27			
TLD-100-3	9.94	12.65			
TLD-100-4	9.92	12.59			
TLD-100-5	9.92	12.24			

II.5 Linearity factor (f_{lin})

For high doses, the measured response of a TLD shows a supra-linearity that changes to a gradual break-down beyond 10^4 rads as is shown in Figure 1. (f_{lin}) brings the necessary correction to the measured dose. An important correction is needed for a direct reading. The integral value of the self-irradiated dose, due to decaying tritium atoms, in a TLD will certainly not go beyond 5 rads. Therefore, (f_{lin}) is equal to 1.00 in an indirect reading.

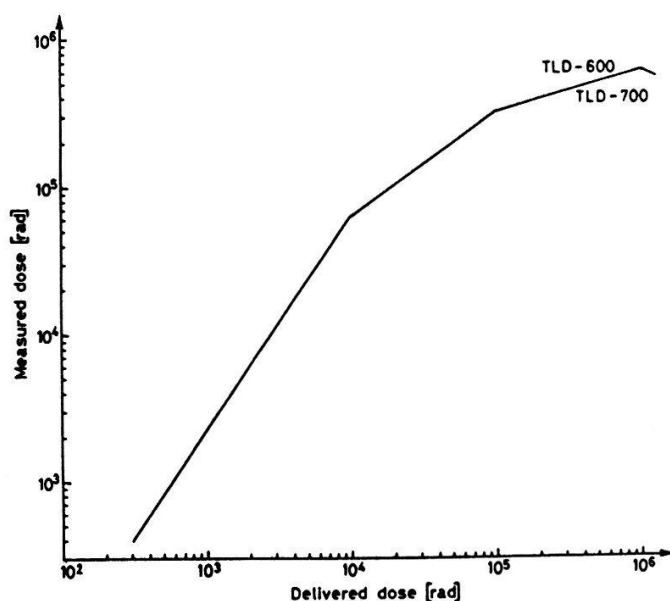


Figure 1

An irradiated TLD could be considered as a thick beta source after the annealing process. The following empirical equation relates the dose rate at the surface of the crystal to its activity [5]:

$$D = 1.07 S E$$

where D is the dose rate in [rad/h], S is the specific activity in [$\mu\text{Ci/g}$] and E is the mean β energy per disintegration in [MeV]. It is suggested to be $1/3$ of the maximum energy of the beta spectrum.

III. Experimental results for tritium production in LBM [2]

Tritium production measurements were carried out in the LBM. Samples of Li_2O ($m = 0.38 \text{ gr}$; $\rho = 1.53 \text{ gr/cm}^3$) and TLD-600 ($m = 0.022 \text{ gr}$; $\rho = 2.645 \text{ gr/cm}^3$) were placed symmetrically with respect to the central rod at different depths of the LBM. Therefore, each pair of Li_2O and TLD-600 samples were subjected to the same neutron flux distribution. The activities of the Li_2O probes were determined by the liquid scintillation method and those of TLD-600 samples by the procedures described in chapter II. Table 3 summarises the experimental results:

Table 3

Depth in LBM [cm]	Li_2O activity [nCi]	Relative activity nCi/ Li^6	*TLD-600 activity [nCi]	R a nCi/ Li^6
0	4.18	0.3632	1.66	0.3162
3	1.24	0.1077	0.615	0.1171
6	1.01	0.0878	0.44	0.084
12	0.63	0.0547	0.29	0.055
21	0.37	0.0322	0.19	0.036
30	0.19	0.0165	0.13	0.024
39	0.16	0.0139	0.09	0.017
48	0.10	0.0087	0.07	0.0133

*Samples were self-irradiated for 147 days in a very low back-ground area

IV. Conclusions

Discrepancies are observed between the results of the two methods. Since the neutron spectrum is not known in the blanket due to the measurement difficulties (NE-213 standard detector is too big to be placed inside LBM). The analysis of the results is somewhat complicated. The results lead, nevertheless, to the following remarks:

- Since Li_2O samples contain natural lithium, TLD-100 should have been used to be able to directly compare the results obtained from the two methods.
- The empirical equation relating the accumulated dose in a TLD to its activity should be reexamined.

Further experiments are on the way to have fresh measurements of tritium production using TLD technique.

REFERENCES

1. S.I. Abdel-Khalik et al.:
Nuclear Technology/Fusion
March 1984, pp. 189-208.
2. **Lithium Blanket Module Program-Neutronics Analysis**
General Atomic Technologies; GA-C17467, Vol. V-B, June 1985.
3. Saber Azam:
H.P.A. , 1985, pp. 806-810.
4. Saber Azam:
Preliminary Calibration of Tritium Breeding Measurement in LBM
IGA-EPFL-LPR 137, February 1986.
5. **Radiation Protection Procedures**
IAEA, Vienna, Safety Series No. 38, 1973.

$\bar{p}$ - Annihilation at Rest in Gaseous Deuterium

The Asterix Collaboration, presented by J. Riedlberger,
Physics Institute of University Zürich

The production of the strange baryon Λ has been studied to illuminate antiproton annihilation mechanism at rest involving more than one nucleon in nuclei. The deuterium data are compared to similar data for a nitrogen target. Furthermore data for the channel $\bar{p}n \rightarrow 2(\pi^+ \pi^-) \pi^-$ will be presented, bearing on the existence of a possible broad neutral state at 1480 MeV.

Trinucleon D to S state asymptotic normalizations deduced from the ${}^4\text{He}(\bar{d}, {}^3\text{He}){}^3\text{H}$ analyzing powers and cross section measurements.

B. Vuaridel, W. Gruebler, V. König, P.A. Schmelzbach, K. Elsener, J. Ulbricht, D. Singy, Ch. Forstner, M. Bittcher, Institute for Medium Energy Physics, ETH, CH-8093 Zurich, M. Bruno, F. Cannata and M. D'Agostino, Physics Department, University of Bologna, M. Borbély, Central Research Institute for Physics, Budapest

The analyzing power A_y , A_{yy} , A_{xx} and the cross section angular distributions of the ${}^4\text{He}(\bar{d}, {}^3\text{He}){}^3\text{H}$ reaction have been measured at the energies $E_d = 35$ and 45 MeV with the polarized deuteron beam from the SIN injector cyclotron. New constraints on the trinucleon D to S state asymptotic normalizations η_t and $\eta_{{}^3\text{He}}$ were obtained in extrapolating the tensor analyzing powers in the $Z=\cos\theta$ variable to the proton and neutron transfer poles.

K α -Röntgenlinien mehrfachionisierter Molybdän Atome

B. Perny¹⁾, J.-Cl. Dousse¹⁾, M. Gasser¹⁾, J. Kern¹⁾, Ch. Rhône¹⁾, Z. Sujkowski²⁾, P. Rymuza²⁾.

¹⁾Physikinstitut der Universität, Pérolles, 1700 Fribourg/Schweiz

²⁾Institute for nuclear studies, 05-400 Swierk/Poland

Am Injektor Zyklotron des SIN wurden Molybdäntargets mit ${}^4\text{He}$ und ${}^{16}\text{O}$ Ionen bombardiert. Die dabei entstehenden K α -Röntgenlinien wurden mit einem DuMond Kristallspektrometer gemessen. Dank der hohen Energieauflösung (6.5 eV bei 17.5 keV) war es erstmals möglich, Satellitenlinien mit bis zu drei zusätzlichen Löchern in der L-Schale zu beobachten. Die experimentellen Resultate werden mit Modellrechnungen verglichen.

DAS ALTER DES UNIVERSUMS

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

Auszug: Für jede Art von Kosmologie ist das Alter die schwierigste Grösse, denn im Unterschied zu den Naturkonstanten und Parametern ist die Zeit eine echte Variable. Das aktuelle Alter muss am einzelnen Phänomen abgefragt werden. Das Hubble-"Alter" ist genau wie die Hyperfeinperiode eine echt konstante Zeit und darf nicht mit dem aktuellen Alter verwechselt werden. Jede Quantenstruktur resoniert nun mit dem Universum direkt und indirekt. Aus über 10 verschiedenen Strukturen, deren räumliche bzw. zeitliche Linearabmessungen über 25 bzw. 9 Grössenordnungen variieren, und insgesamt 25 auswertbaren Fällen, lässt sich das Alter unseres Universums zu $(12.64^{+0.74}) \times 10^9$ J bestimmen. Nichtdirekte Methoden dürfen diesen Wert nicht übersteigen.

Einführung

Die Fragen rund um die kosmologische Altersdatierung bilden ein recht kniffliges Thema. Noch vor relativ kurzer Zeit sah es so aus, als ob auch die WW-Kosmologie auf diese Frage keine Antwort geben könne. Dies wäre durchaus plausibel gewesen, ist doch nicht einzusehen, wie ein Modell, das hauptsächlich struktural ist, und überdies noch besonders den Grundzustand sieht, auf eine so typisch dynamische Grösse, wie sie nun in der Zeit vorliegt, eintreten könnte. Nun erweist es sich aber, dass sich das Alter, bzw. die aktuelle Grösse des Universums theoretisch in jeder beliebigen Quantenstruktur in Form von direkter und indirekter Resonanz zeigt. Dies ist an sich erfreulich, gibt es doch WW-kosmologisch oo viele Quantenstrukturen. Die praktische Beobachtung ist nun aber eine ganz andere Sache. Verwirrend ist überdies der Umstand, dass wegen des gegenwärtigen universalen Alters die Resonanz zufälligerweise in die unmittelbare Nähe eines Quantenzustands der universellen s-r-Struktur zu liegen kommt. Bei der direkten Resonanz ist dies der r_{31} -, bei der indirekten der s_{31} - und annähernd gleichzeitig Bohr-Zustand der Lyman-Hauptserie. Am konkreten Phänomen müssten dann also eine Art Doppellinien- bzw. Dreifachlinien-Feinheiten beobachtet werden, die aber wegen mangelnder Auflösung einerseits und ungenügender Ausgeprägtheit andererseits in den allerwe-

nigsten Fällen nachweisbar sind. Darin gründete lange Zeit die paradoxe Feststellung, wie denn ein Phänomen, das rechtens einem fixen Quantenzustand, beispielsweise einer typischen Quantenzeit, anzugehören schien, gleichzeitig das Alter, also eine variable Zeit wiedergeben könne. Mit der Zeit vergrösserte sich die Zahl der Phänomene, die sich für eine Altersdatierung eignen, und damit die Erfahrung, wie mit dem Phänomen umgegangen werden muss. Mit etwa einem Dutzend verschiedenen Fallsituationen ist zwar noch keine extrem gute Datierung möglich, da in fast jedem Fall sich feinere systematische Abweichungen, sei es seitens der Beobachtung, sei es infolge von Individualabweichungen von der Norm-Wechselwirkung (WW) etc., einschleichen können. Das Alter ist also zweifellos noch ein vorläufiger Wert, der immerhin trotz der Varietät und dank des beachtlichen Raum- und Zeitbereichs, in welchem sich die Resonanzen abspielen, als ein guter und verlässlicher Mittelwert betrachtet werden darf, der zweifellos mindestens eine Grössenordnung besser ist als alle aufgrund nichtdirekter Methoden erhaltenen Datierungsergebnisse. Die vorliegende Methode ist somit die erste, und vorderhand einzige, die sich in direkter Weise mit der Frage des Alters unseres Universums auseinandersetzen kann. Es ist nun sehr wichtig, dieses Alter von demjenigen der Heim-Theorie [1] zu unterscheiden. Unser Alter bezieht sich auf den Urknall, der vor ca. 12.6 Milliarden Jahren stattgefunden hat. Es handelt sich also gewissermassen um das Eigenalter unseres noch sehr jungen (physischen!) Universums, das wahrscheinlich nur eines von oo vielen potentiell möglichen ist. Heims "Alter" $T=1.72 \times 10^{115}$ s hat aus WW-kosmologischer Sicht hingegen fundamental strukturalen Charakter, ähnlich wie die Hubble-Zeit oder die Hyperfeinperiode, und betrifft die "abgeregte" Endgrösse eines immateriellen (geistigen!) Universums, wiederum nicht zu verwechseln mit der physischen Endgrösse $R_e=6.3 \times 10^{25}$ Lj [2a].

Alter aus direkter und indirekter Resonanz

Trotz der unerschöpflichen Varietät von Phänomenen, in welchen ein einzelnes Quantensystem mit dem universalen Gesamtsystem in Resonanz tritt, lassen sich klar zwei Typen unterscheiden: die direkte und die indirekte Resonanz. Die beiden Resonanzen sind miteinander im Phasenraum durch die Abbildung an der Hauptfixstelle verknüpft.

Prinzip: Das derzeitige universale Alter fällt WW-mässig in den Wirkungsbe-

reich der Lyman-Hauptserie der s-r-Quantenstruktur. In der Lyman-Hauptserie treffen sich s-Zweig und r-Zweig an der Hauptfixstelle R_{gr} , die gleichzeitig Seriengrenze der beiden Zweige ist. Demzufolge fällt die direkte Resonanz in den s-Kontinuumsbereich, die indirekte Resonanz in den r-Kontinuumsbereich. Dies erlaubt eine einfache Beschreibung im Superpositionsbild.

a) Direkte Resonanz (dR): Die dR ist vom additiven Typus. Dem normalen s-Kontinuum von Zuständen, falls im konkreten Phänomen material belegt, erscheinen zusätzliche, gleichphasige Resonanzzustände überlagert. Dies manifestiert sich an der Stelle der dR als lokale Resonanzüberhöhung in der Zustandsverteilung. Falls die Kontinuumsverteilung unbelegt ist, haben die dR-Zustände häufig den Aspekt von "Ausreissern". Ein Beispiel hiefür ist die Hilda-Gruppe der Planetoiden. Da die der dR zugrundeliegende Länge oder Zeit einer Rezession in bestimmter WW angehört, so steht sie mit dem aktuellen universalen Radius bzw. dem universalen Alter über das Verhältnis der Rahmen-WW-Feinstrukturkonstanten von gravitativ-universaler und Phänomen-Rezession in direkter affiner Verknüpfung.

b) Indirekte Resonanz (iR): Die iR ist vom subtraktiven Typus. Liegt ein r-Kontinuum vor, so erscheinen die iR-Zustände als Folge einer antiphasigen Superposition subtrahiert, d.h. im Phänomenkontinuum erscheint eine Lücke. Prominentestes Beispiel ist wohl die Cassini-Teilung des Saturnrings. Es kann auch eine Art Variante zum Pauli-Lückensatz vorliegen, d.h. die Kontinuumszustände selber wirken wie besetzt oder blockiert, und nur die Lückenzustände sind frei. Dieser interessante Fall liegt beim mentalen Gehirnton fi_s^2 und bei der "persönlichen Gleichung", also der nichtunterschreitbaren Reaktionszeit vor. Beispiele dieser Kategorie sind in der Tabelle mit iR bezeichnet. Verwirrend ist nun folgender Umstand: obwohl die iR ein Geschehen im r-Kontinuum ist, ist die Phänomenlänge (bzw. -zeit), weil links von der Fixstelle liegend, abbildungsmässig ein s-Zustand. Die zugehörige direkte Länge (bzw. Zeit) ergibt sich aus der Phasenraumrelation $r = \sqrt[3]{r_{\infty,1}^3}/s$. Diese Länge, oder die ihr proportionale Lichtzeit, steht dann wieder mit dem universalen Radius (bzw. Alter) im Verhältnis der beiden Rahmen-WW.

Phänomen-Rahmen-WW α_i

Die Altersbestimmung setzt aber nicht nur die Kenntnis von Phänomen-

Tabelle

Universales Alter

Räumliche Methoden			Zeitliche Methoden		
Art der Beobachtung	dir./indir.Res.	t_u (10 ⁹ J)	Art der Beobachtung	dir./indir.Res.	t_u (10 ⁹ J)
1. Quasardichte-Maximum	dR	13.3	I. Blitz-Pausen	dR	12.79
2. QSO-Galaxie-Assoziationen [2b]	dR	12.64	II. e+ Lebensdauern LiX	dR	13.44
3. Stern-/Kugelhaufen	dR	13.1	NaX	dR	12.63
4. Planetoiden, Hildagruppe	dR	12.54	KX	dR	13.17
" Lücke in r-Kontin.	iR	12.54	MX ₂	dR	13.44
5. Saturnring, E-Ring	dR	12.26	IA-Alkali-Metalle	dR	11.02
" Cassini-Teilung	iR	13.22	Erdalkali-Metalle	dR	13.70
6. Milchstr., "Expanding cloud"	iR	13.16	IV-Elemente	dR	11.83
7. Chakras, Wurzel-Chakra [3]	dR	12.20	III.Gehirnton fis ² (743.7Hz)	iR	12.10
Milz-Ch.	dR	11.91	IV. "Persönliche Gleichung"	iR	13.5
Nabel-Ch.	dR	12.22			
Herz-Ch.	dR	12.52	<u>Mittelwerte:</u>		
Hals-Ch.	dR	11.61	$\bar{t}_u$ (Raum) =	$(12.47^{+0.58}) \times 10^9$ J	
Stirn-Ch.	dR	12.11	$\bar{t}_u$ (Zeit) =	$(12.76^{+0.87}) \times 10^9$ J	
Scheitel-Ch.	dR	13.90	$\bar{\bar{t}}_u$ (Raum+Zeit) =	$(12.64^{+0.74}) \times 10^9$ J	

dR- und iR-Längen (bzw. -Zeiten) voraus, sondern überdies die Kenntnis der Rahmen-WW jener Rezession, in welche das Phänomen eingebettet ist. In einigen Fällen ist die Rahmen-WW anderweitig bekannt. So gehorcht z.B. die universale Rezession der protonisch-gravitativen Feinstrukturkonstante α_g ; s-r-Struktur und dR der Quasar-Galaxie-Assoziationen sind ein wunderbares Beispiel dafür [2b]. Oder: weil das Gehirn dem schwachen (w) Bohratom, bzw. dem superschwachen (b) Comptonraum eingebettet ist, entsprechen die Griffllängen der Pendler (Lecherleitung!) s-r-Lyman-Zuständen in α_w -WW. Oder: die Perioden der Gehirnrhythmen $\alpha, \beta, \theta, \delta$ des EEG entsprechen den t_s -, t_r -Lyman-Zuständen in Gehirnwellen-WW α_{GW} . In der Regel aber kann die WW in einfacher Weise aus dem Phänomen selbst ermittelt werden; z.B. koinzidiert der Saturnradius R_{Sat} . ziemlich genau mit $s_{i,2l}$ jener WW i, welche auch die Ringstruktur bestimmt, aus Gründen, die hier nicht weiter erörtert werden können. $s_{i,2l}$ aber bildet direkt auf $s_{g,2l}$ der universalen Rezession ab, womit α_i bekannt ist. Damit ist aber auch $r_{i,ool} = R_{gr}(\alpha_g/\alpha_i)$ bekannt, also jene Grösse, die für die Auswertung der iR benötigt wird.

Kritische Anmerkung

Die meisten Resonanzen sind "zur Zeit" komplex. In manchen Fällen erscheint die Altersbestimmung überhaupt nur deswegen möglich, weil eine "resonanzverstärkte" altersunabhängige Komponente beobachtbar ist. Das Verfahren ist daher paradox aber legitim, da, solange im konkreten Fall die Auflösung nicht gelingt, ohnehin keine bessere Genauigkeit beansprucht werden kann. Diese liegt bei einigen %. Das klassische Beispiel einer iR ist die Feinstruktur des Gehirn- α -Rhythmus. Sie wurde von N. Wiener nicht nur entdeckt, sondern auch sinnrichtig interpretiert [4].

Literatur

- [1] B. Heim, Elementarstrukturen Bd. 2 (Resch, Innsbruck 1984), p.71
- [2a-b] J.T. Muheim, Helv. Phys. Acta a) 57, 787 (1984); b) 57, 781 (1984)
- [3] C.W. Leadbeater, Die Chakras (Bauer, Freiburg i.Br. 1984)
- [4] N. Wiener, Nonlinear Problems in Random Theory (Wiley, New York) 1958) p.77

Theresa Dale, Texas, USA, hat mich in verdankenswerter Weise auf das Chakra-Phänomen aufmerksam gemacht.

STERNBILDUNGSPHASEN, BILDUNGSGESETZ, MASSEN VON STANDARD-SONNE UND -PLANETEN

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

Auszug: Die parameterfreie WW-Kosmologie erlaubt keinerlei Anpassung. Das Raum-Zeit-Materiegeschehen ist in die Quantenstruktur an sich eingebettet - nicht umgekehrt! Dies gilt für die kosmische Evolution als ganzer wie für das Teilgeschehen, z.B. Stern- und Planetenbildung aus interstellarem Wasserstoff. Diese folgt daher ganz aus dem Modell, wobei den Massen M bzw. Radien R der Phasen von HI -, H_2 -Wolken, Wolkenkern und Protostern die durch Lyman-s-r-Schachtelung ausgezeichneten Niveaus eines einfach-quantisch angeregten uneigentlichen 13-Niveaus-Multipols (13N-MP) entsprechen, wodurch $M \propto R^2$ resultiert. Den Kondensationsräumen entspricht bei fixer Masse am untern Rand Matelstruktur, am obern Rand eine Lyman-schachtelung. Standardmassen sind absolut angebbar, Individualmassen in 3. Näherung auf einige % quantisch lokalisierbar.

Einfach- und Doppelkondensation

Das Kondensationsgesetz $M \propto R^2$ [1] ist universell gültig und darf im Massenbereich von über 120 Größenordnungen als gesichert gelten. Dieser Bereich erstreckt sich von verschwindend kleinen Subelementarteilchenmassen bis zur Gesamtnukleonenmasse M_u . Die Spezifität eines Kondensationsvorgangs äussert sich indes im Proportionalitätsfaktor. Zwei Aspekte sind zunächst unterscheidbar: a) Je nach dem Dichtheitsgrad, der vorrangig ist, lassen sich mit zunehmender Verdünnung matelkristalline oder "Kern-Kondensation", "niederatmosphärische" und "hochatmosphärische" Kondensation unterscheiden. Diese Einteilung ergibt sich aus den Eigenschaften der hauptbeteiligten Quantenstrukturen. b) Eine weitere Eigentümlichkeit scheint nun, dass neben der Einfachkondensation (e) auch Doppelkondensation (d) auftreten kann. Letztere ist möglicherweise mit der Bildung von Binärsystemen involviert. In diesem Fall sind die Koeffizienten in la-c) um den Faktor 2 zu erweitern.

Im Fall der Einfachkondensation gilt:

la) "Kern"-Kondensation (matelkrist. Kond.)

$$M_K^{(e)} = \frac{(m_p/m_e) M_{O,St.}}{(3\sqrt{N_u/2\zeta_g} \lambda_{opt})^2} R^2 = \frac{(m_p/m_e) M_{O,St.}}{(a_b/(r/s))^2} R^2;$$

$$\begin{aligned} \zeta_g &= \alpha_g^{-1/2} = 1.3004 \times 10^{19} \\ r/s &= r_{21}/s_{21} = 5.6186 \\ N_u &= 1.108 \times 10^{79} \end{aligned}$$

1b) "Niederatmosphärische" Kond.

$$M_N^{(e)} = \frac{(m_p/m_e) M_{O,St.}}{(a_b/e)^2} R^2$$

1c) "Hochatmosphärische" Kondensation

$$M_H^{(e)} = \frac{(m_p/m_e) M_{O,St.}}{a_b^2} R^2$$

Oder numerisch für M/R-Einheiten in kg/m bzw. M_O/pc :

$$1a) M_K^{(e)} (kg) = 8.546 R^2 (m)$$

$$M_K^{(e)} (M_O) = 4.092 \times 10^3 R^2 (pc)$$

$$1b) M_N^{(e)} (kg) = 1.916 R^2 (m)$$

$$M_N^{(e)} (M_O) = 9.155 \times 10^2 R^2 (pc)$$

$$1c) M_H^{(e)} (kg) = 2.594 \times 10^{-1} R^2 (m)$$

$$M_H^{(e)} (M_O) = 1.239 \times 10^2 R^2 (pc)$$

Zum Kondensationsgesetz $M \propto R^2$

Das Kondensationsgesetz hat nur scheinbar nichtquantenphysikalische Form. In Wirklichkeit gehören (M, R) einer quasikontinuierlichen Menge an. Die Diskretheit wird bei der Herleitung offensichtlich. Sie kann aus Platzgründen nur angedeutet werden. Ähnlich wie schon bei den grossen Halbachsen der Planetenbahnen liegt auch hier den Radien R des Kondensations- oder Ballungsraumes ein Multipol zugrunde. Da die Kondensation aber ein dynamisches Geschehen ist, ist der MP nicht abgeregt, sondern partiell angeregt. Diese partielle Anregung drückt sich hier im ganzzahligen Exponenten 2 aus. Ähnlich wie der 9N-MP der Planetenbahnen bildet auch der R zugrundeliegende MP auf den Quark(Q)-MP ab. Der MP behält zwar seine primäre Längenbezogenheit bei (d.h. WW-kosmologisch sind primär mit den Niveaus des MP Längen, sekundär Massen verknüpft!), doch ist die Verknüpfung von M und R anders als bisher, eben $M \propto R^2$. Die quadratische Abhängigkeit ist das Ergebnis der (im Prinzip ∞ komplexen) Tatsache, dass (im Prinzip ∞ viele) verschiedene Quantenformen auf die Niveaus des Q-MP Einfluss nehmen. Die Erwähnung zweier dieser Formen ist unabdingbar: (1) Als Folge der Masse-Ladungs-Asymmetrie von p und e existieren zur Normalform der (protonisch-) gravitativen WW $\alpha_g = e^2/4\pi\epsilon_0 \hbar c \hat{=} m_{g,p}^2 = m_g^2$ auch die Oberformen $\alpha_{g,\Delta p}, \alpha_{g,\Delta^2 p}, \dots$, bzw. die Unterformen $\alpha_{g,\delta p}, \alpha_{g,\delta^2 p}, \dots$, wo sich Δ, δ auf die ladungsäquivalente Masse beziehen: $m_{g,\Delta p} = (m_p/m_e) m_{g,p}, m_{g,\delta p} = (m_p/m_e)^{-1} m_{g,p} = m_{g,e}$ etc. Die Normalform wirkt mit $m_{g,p}$ auf das Niveau des stabilen p , die 1. Unterform $\alpha_{g,\delta p}$ mit $m_{g,e}$ auf das comptonlängenmässig 6 Progressionsschritte tiefere t-Q-Niveau. Demzufolge wirkt die Standardsonnenmasse $M_{O,St.} = m_{g,e} N_u$ affin auf das t-Q-, die Supersterne Masse $(m_p/m_e) M_{O,St.}$ auf das p-Niveau, und $(m_p/m_e)^2 M_{O,St.}$ auf das zu t-Q spiegelsymmetrische Niveau

(d.h. 6 Progressionsschritte über p-Niv.). Da, Ganzzahligkeit des Exponenten im Potenzgesetz $M \propto R^n$ vorausgesetzt, nur $n=2$ die zusätzliche Bedingung der "angeregten" Progression ζ_f^* : $\zeta_f(\zeta_f^*(2, zu erfüllen vermag, ist $\zeta_f^* = \sqrt[12]{m_p/m_e} = x_1 \zeta_f = 1.87075$ festgelegt, wo $\zeta_f = \sqrt{\pi}$, $x_1 = 1.05546$ annähernd gleich $2^{1/12} = 1.05946$ der temperierten Stimmung. (2) Da mit der Sternbildung ein Uebergang von der atomaren HI-Phase zur molekularen H_2 -Phase einhergeht, nimmt die mikroskopische Molekülformationszeit τ bzw. der Lichtweg $c\tau$ auf den Q-MP Einfluss. Auf das p-Niveau operiert dann $\lambda_{opt} = \tau_{opt} c = \lambda_e S_\gamma$, also jene hochausgezeichnete Wellenlänge der Planck-Rezessionsstrahlung, die für beliebige i-WW den Rezessionsradius in den stationären Bohrradius a_i überführt: $R = a_i = \lambda_e / \alpha_i = \lambda_{opt} f_i$ ($f_i = i$ -WW-Knotenzahl). Auf das t-Q-Niveau wirkt dann die mit der Unschärferelation gerade noch verträgliche Minimalzeit $\tau_{min} = \tau_{opt} / \zeta_f^6 = 2.928 \times 10^{-14}$ s. Diesem Wert entspricht die im FK-FMP empirisch gesicherte Grenzzeit für Molekülionenformation $\tau_2 = (3-3.5) \times 10^{-14}$ s [2a].$

M ist als kondensierende Masse zum sphärischen Ballungsraum R aufzufassen. Zu einem bestimmten M sind 3 R-Werte quantenphysikalisch ausgezeichnet. Sie entsprechen wichtigen Werten einer s-r-Quantenstruktur in der Lyman-Hauptserie, wobei $R = r_{i,21}$ als "hochatmosphärischer", $R = a_i = r_{i,21}/e$ als "niederatmosphärischer", und $R = s_{i,21} = r_{i,21}/(r/s)$ als "Lyman-Kern-" oder "matelkristalliner" Ballungsradius bezeichnet wird. Die Koeffizienten in la-c) sind für das p-Niveau des Q-MP angeschrieben: $M = (m_p/m_e) M_{o,St.}$; $R = r_{21} = a_b = \lambda_e / \alpha_b = 17.20 L_j = 5.276 pc$. Das ist der superschwache Bohrradius. Er ist biologisch ausgezeichnet und konstituiert die kosmische Gesellschaftszelle. a_b wirkt hier als "Selbstgravitationsradius" der interstellaren Gase. Die astrophysikalische Beobachtung [1] wird durch lc) im Bereich $0.2(R(300 pc$ beschrieben, mit einem leichten Trend zu $M_H^{(d)}$ für $0.2(R(10 pc$. la) entspricht einer Kondensation im matelkristallinen Régime. $\lambda_{opt} = \tau_{opt} c = 3.763 \times 10^{-4}$ m ist dabei der dem p-Niveau zukommende Zellradius zum matelkristallinen Urgitter.

Standardmasse der Sonne (Fixstern)

Die Masse der Standardsonne beträgt $M_{o,St.} = m_{g,e} N_u = (m_p/m_e)^{-1} m_g e N_u = 3.737 \times 10^{30} kg = 1.877 M_\odot$. Auch hier liegt ein Matelkristall vor, mit dem elektromagnetischen Bohrradius (Wasserstoffatom!) $a_s = \lambda_e / \alpha_s$ als Zellradius. Wie beim Nukleon ist die Masse hauptsächlich im Lyman-Kern konzentriert, dessen Radius

$R_{O,St.} = a_s (s/r)^3 \sqrt{N_u/2\zeta_g} = a_s \zeta_g = 6.879 \times 10^8 \text{ m}$. Die Individualmasse der Sonne ist $M_{O,St.}/1.877$, d.h. mit $1.877 \cong \zeta_f^*$ sehr angenähert MP-quantisch versetzt. $M_O = 1.990 \times 10^{30} \text{ kg}$ und $R_O = 6.96 \times 10^8 \text{ m}$ sind die beobachteten Werte.

Standardmassen der Planeten (Einfach-Kondensation)

Auch die Planetenmassen folgen einem universellen Muster, das durch die s-r-Struktur festgelegt ist. Während die Sternformation lc) folgt, wird der Ballungsraum der mittleren Planetenmasse $\bar{m}$ matelkristallin durch la) bestimmt. Standardmässig sind 4 Hauptmassen (1)-(4) zu erwarten, um welche die Individualmassen, grundsätzlich nicht voraussagbar, aber nachweislich quantisch placierte, streuen. Auch hier kommen M/R^2 -Dynamik und Lyman-Schachtelung vor. $\bar{m}$ ist an eine s_{21} -Länge gekoppelt. Die 4 Standardwerte sind dann: (1) = $(s_{31}/s_{21})^2 \bar{m}$; (2) = $\bar{m}$; (3) = $\bar{m}/(r/s)^2$; (4) = $\bar{m}/(r/s)^4$. Der geradzahlige Exponent ist die Folge davon, dass die Bezugslänge, an die $\bar{m}$ koppelt, gemäss $M \propto R^2$ quadratisch eingeht. $\bar{m}$ entsteht folgendermassen: In der 12-Schritt-Progression (13N-MP!) von $\zeta_f^{*12} = m_p/m_e$ ist der 9. Schritt ausgezeichnet, nämlich $\zeta_f^{*9} = 280.6 \cong m_\pi/m_e = 273.19$. Dies gilt für alle WW-Formen, insbesondere auch für die 3. Unterform, $\alpha_{g,\delta}^3 p$, denn diese koinzidiert mit $\bar{m} = M_{O,St.} (m_p/m_e)^{-2} (m_\pi/m_e) = 3.024 \times 10^{26} \text{ kg} = 50.59 m_E$, wobei die Erdmasse $m_E = 5.977 \times 10^{24} \text{ kg}$. Der Ballungsraum von $\bar{m}$ ist gemäss la) identisch mit dem Quantenraum des Planetensystems, d.h. gemäss la) ist $R(\bar{m}) = 5.948 \times 10^{12} \text{ m} = 39.75 \text{ AE} = r(\text{Pluto})$ [2b]. $\bar{m}$ hat die Bedeutung einer Planetenmasse in O. Näherung. Als 1. Ng. dürfen die 4 mutmasslichen Standardmassen (1)-(4) von Tab. 1 bezeichnet werden. Die einzelnen Planeten haben die Tendenz, im Kondensationsprozess einen der Werte (1)-(4) anzustreben, vermutlich bis auf einen Faktor der Grössenordnung 2. Die Massenverteilung im Sonnensystem, d.h. die Art der Belegung von (1)-(4) in Abhängigkeit von der Entfernung zur Sonne, ist ebenfalls universell und durch das komplexe Zusammenwirken von MP- und s-r-Quantenstrukturen bestimmt.

Tabelle 1

(1)	=	$(s_{31}/s_{21})^2 \bar{m}$	=	$196.94 m_E$	=	$1.177 \times 10^{27} \text{ kg}$	$s_{31}/s_{21} = 1.97308$
(2)	=	$\bar{m}$	=	$50.59 m_E$	=	$3.024 \times 10^{26} \text{ kg}$	
(3)	=	$\bar{m}/(r/s)^2$	=	$1.602 m_E$	=	$9.575 \times 10^{24} \text{ kg}$	
(4)	=	$\bar{m}/(r/s)^4$	=	$5.076 \times 10^{-2} m_E$	=	$3.033 \times 10^{23} \text{ kg}$	

(1)-(4) sind als Richtwerte zu verstehen. Gemäss der M/R^2 -Dynamik ist zu erwarten, dass um die einzelnen Richtmassen ζ_f^{*+i} -Quantisierung stattfindet. In der Regel ist aber nicht angebar, ob die 2. Ng. nach höheren oder niedrigeren Werten zielt. Lediglich im Fall der grossen Planeten Jupiter und Saturn ist aufgrund der Eigenschaften der s-r-QS für Jupiter eher $\zeta_f^*(1)$ und für Saturn eher $\zeta_f^{*-1}(1)$ zu erwarten. Sicher ist jedoch, dass "niedrigere Anregungen" wahrscheinlicher sind, d.h. ζ_f^{*+i} -Abweichungen häufiger sind als $\zeta_f^{*+(i+1)}$ -Abweichungen, vorausgesetzt, dass (1)-(4) die wahren Standardmassen sind(!?).

Quantische Placierung der Individual-Planetenmassen

Es liegt die Annahme nahe, dass die "temperierte" 12-Schritt-Progression, die der M/R^2 -Dynamik zugrundeliegt und die grossen Intervalle ζ_f^* bestimmt, sich bei den feineren Intervallen fortsetzt, gemäss $x_2 = \sqrt[12]{\zeta_f^*} = 1.05358$. Dies bedeutet, dass in 3. Ng. die Individualmassen annähernd quantisch placiert sind: $x_2^{+i} \zeta_f^{*+k}$ (1-4), mit $i, k = 0, 1, 2, \dots$, wo i, k klein und häufiger als $(i+1)$, $(k+1)$. Tabelle 2 zeigt die Planetenmassen gemäss Modell in 3. Ng. für die angegebene Quantenstufe im Vergleich mit der Beobachtung. Die Tatsache, dass die Erwartung i, k häufiger als $(i+1)$, $(k+1)$ durchbrochen ist, scheint anzudeuten, dass (1)-(4) nur approximative Standardmassen sind.

Tabelle 2

Planet	Quantenstufe	Masse (Modell)	Masse (Beob.)	$\Delta m/m$ (%)
Merkur	x_2^2 (4)	$5.634 \times 10^{-2} m_E$	$5.580 \times 10^{-2} m_E$	0.96
Venus	$x_2^{-1} \zeta_f^{*-1}$ (3)	0.8128	0.8148	-0.24
Erde	$x_2^3 \zeta_f^{*-1}$ (3)	1.001	1.000	0.1
Mars	$x_2^2 \zeta_f^*$ (4)	1.054×10^{-1}	1.078×10^{-1}	-2.2
(Plan.)	ζ_f^{*-1} (2)	27.04 bzw. 50.59 (1?)		
Jupiter	$x_2^{-3} \zeta_f^*$ (1)	315.01	317.818	-0.89
Saturn	$x_2^{-2} \zeta_f^{*-1}$ (1)	94.84	95.112	-0.28
Uranus	ζ_f^{*-2} (2)	14.45	14.517	-0.46
Pluto	ζ_f^{*2} (4)	1.776×10^{-1}	1.8×10^{-1} ?	-1.2

Fig. 1 zeigt schematisch die modellmässige Erwartung für die Planetenmassen (gestrichelt!) neben der aktuellen quantischen Placierung (i,k) ($\leftrightarrow$).

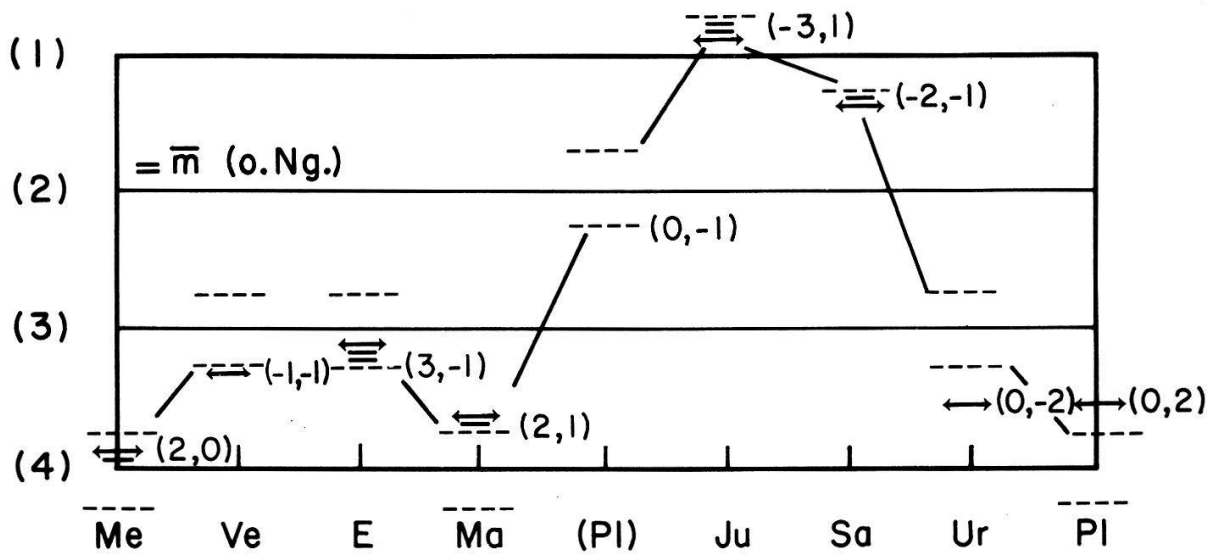


Fig.1

Gesamtmasse der Planetoiden: Neptun gehört nicht zum 9N-MP, jedoch die Planetoiden, vertreten durch Ceres. Die mittlere beobachtete Masse der 8, bzw. mit Neptun, 9 Planeten ist $\bar{m}_8 = 53.7m_E$ bzw. $\bar{m}_9 = 49.65m_E$, verblüffend nahe bei $\bar{m} = 50.59m_E$. Daraus lassen sich Grenzen für die Planetoidenmasse abschätzen: a) $m_{Pl.u} = 9\bar{m} - 8\bar{m}_8 = 25.7m_E$, bzw. b) $m_{Pl.o} = 10\bar{m} - 9\bar{m}_9 = 59.0m_E$, also in der Tat selber nahe beim modellmässig erwarteten Wert $(2) \bar{m} = 50.59m_E$. Dieser Wert ist wesentlich höher als der derzeitig astronomisch geschätzte Wert (m_E). Die Ursache für die Planetoidenbildung ist fundamentaler Natur und vermutlich eine Folge der Koinzidenz des Planetoiden(=Ceres!)-Niveaus im Planeten-MP mit demjenigen Niveau des Q-MP, dem die Fleck-Superformmasse $m_{F,\Delta O}$ [2b] angehört, die selber zwischen b-Q und c-Q placiert ist. Gemäss Fleckdynamik sind $S_Y = 9.746 \times 10^8$ Planetoidenfragmente zu erwarten, eine Zahl die wesentlich grösser ist, als derzeit geschätzt wird (10^5 !). Dies mag daran liegen, dass nur ein verschwindend kleiner Bruchteil aller Planetoiden beobachtbar ist.

F. Casoli, D. Downes, E. Falgarone, S. Guilloteau, C. Montes und N. Straumann sei für Unterlagen herzlich gedankt.

Literatur

- [1] M. Pérault et al., Astronomy and Astrophysics 152, 371 (1985)
- [2a-b] J.T. Muheim a) 7th Int. Mass Spectr. Conf. Florence, Ext. Abstr. 204-P/1, (1976); b) Helv. Phys. Acta 59, 1047 (1986)

THEORETISCHE PHYSIK

ON THE USE OF AUTOMATED REASONING SYSTEMS

B. Humpert *)

Institut de Physique Nucléaire
Université de Lausanne
CH-1000 LAUSANNE, Switzerland

and

Artificial Intelligence Group
HASLER Research Laboratories
CH-3000 BERN 14, Switzerland

Abstract

We give a short introduction into "Automated Reasoning (AR)" by explaining the essentials of several modern deduction techniques within first-order predicate logic. In this framework, there exists a multitude of AR-applications in basic and applied research whereby the problem context is described by a set of 'axioms' and the solution is encoded by the 'conjecture'. We discuss a few typical examples.

*) also at CERN

Contributed to the Meeting of the Swiss
Physical Society, Bern, 9-10 October 1986

1. Introduction

Automated Reasoning Systems ($\equiv$ ARS) [1,2] (originally called Automated Theorem Provers ($\equiv$ ATP)), are symbolic computer programs which allow for logical deductions within the framework of first-order predicate logic ($\equiv$ FOL) [3]. FOL goes back to G. Boole (1854) and G. Frege (1879) and has since that time developed into a complete theory with major contributions from: L. Löwenheim (1920) [4] proving for the first time that a formula is satisfiable in a countable domain, if it is satisfiable at all; T. Skolem (1920) [5] who introduced the functional form of a formula and proved that it also is satisfiable; J. Herbrand (1930) [6] known for the Herbrand Universe; P.C. Gilmore (1960) [7] giving the first computer implementation of a decision algorithm by Skolem, which was improved by M. Davis and H. Putnam (1960) [8]; J. Robinson (1965) [9] who put scattered pieces of information together by proposing the Resolution Principle. Since that contribution, ATP has developed rapidly into a major field of artificial intelligence [3,1].

Deciding the satisfiability of an arbitrary formula - Hilbert (1928) called it the 'Entscheidungsproblem' - was shown by Turing and Church (1936) to be impossible. The importance of this insight for ATP is that no algorithm can hope to decide on arbitrary formulas. Ways out are: (i) to renounce on the algorithmic property of a solution, that is, to design a decision process which may not terminate. This is the nature of resolution, which terminates correctly for unsatisfiable formulas, but may not terminate for satisfiable ones; (ii) to renounce on completeness, that is, to design an algorithm which terminates correctly on all formulas in a subclass of first-order formulas, but may not give an answer on individual members.

This paper aims to give a short insight into the way AR-systems deduce new information from a set of 'axioms' which fix the context of a problem, and how they prove conjectured new information to follow logically from the 'axioms', meaning the context description of the problem. We thus will explain the functioning mode of four deduction algorithms: Resolution [9], Connection-Graph Procedure [10], Matrix-Reduction [11], and Compactness Method [12].

Once we have a feeling how AR-systems work we turn to the AR-applications. We first give a general overview about the fields where these systems have been applied successfully and then discuss two illustrative examples to show how particular problems are solved.

2. Demonstration Example

In order to present the calculational aspects of the deduction methods, to be discussed below, we choose a simple example problem: The Grandparent Theorem. This theorem states that if everyone has a parent and 'a' is a grandparent of 'c' whenever 'a' is a parent of 'b' and 'b' is a parent of 'c', then everyone has a grandparent. If FOL we write:

- (1): $(\forall x \exists y) P[y, x]$... everyone has a parent.
 (2): $(\forall a, b, c) P[a, b] \wedge P[b, c] \rightarrow G[a, c]$
 ... 'a' is a grandparent of 'c' whenever 'a' is a parent of 'b' and 'b' is a parent of 'c'.
 (3): $(\forall d, e) G[e, d]$... everyone has a grandparent.

where (1) and (2) are the 'axioms' describing the context, and (3) is the 'conjecture'. Transforming these statements in Skolem normalform (or matrixform) whereby the premises are supposed to be true and the conjecture is denied, we get:

- (1): $P[fx, x]$
 (2): $\sim P[a, b] \vee \sim P[b, c] \vee G[a, c]$
 (3): $\sim G[e, h()]$

Note $fx \equiv f(x)$ and $h()$ are Skolem-functions. In the following we will use this example to demonstrate the different deduction mechanisms.

3. Resolution [9]

Since the disjunction of 0 literals is false, it is evident that a matrix containing an empty clause is unsatisfiable. The Resolution Method seeks to derive a matrix containing the empty clause by conjoining new clauses, called resolvents, using the following inference rule:

Let $K_1 \vee K_2 \vee \dots \vee K_m$ and $L_1 \vee L_2 \vee \dots \vee L_n$ be clauses in the matrix and let σ be the most general unifier of $\{K_i, \sim L_j\}$. Then the clause

$$\varrho \sigma (K_1 \vee \dots \vee K_{i-1} \vee K_{i+1} \vee \dots \vee K_m \vee L_1 \vee \dots \vee L_{j-1} \vee L_{j+1} \vee \dots \vee L_n)$$

where ϱ is a renaming substitution, is called: resolvent, and it may be added to the matrix. Since the truth of a resolvent follows from that of its parents, an empty clause derived in this way demonstrates the unsatisfiability of the original matrix.

A derivation of the empty clause in our example might look like this, where we conveniently number the literals by superscripting them with an index, and where σ_{ij} denotes the most general unifier of literal i and the negation of literal j :

- (1): $P^1[fx, x]$
 (2): $\sim P^2[a, b] \vee \sim P^3[b, c] \vee G^4[a, c]$
 (3): $\sim G^5[e, h()]$
 (4): $\sim P^6[b_4, c_4] \vee G^7[fb_4, c_4]$ since $\sigma_{21} = \{fb/a, b/x\}$
 (5): $G^8[ffc_5, c_5]$ since $\sigma_{61} = \{fc_4/b_4, c_4/x\}$
 (6): $\square$ since $\sigma_{58} = \{ffh()/e, h()/c_5\}$

The programming language PROLOG [13] is an application of the resolution method to so-called Horn-clauses, i.e. clauses containing at most one non-negated literal. The clauses in our example are seen to be Horn-clauses.

With the addition of the inference rule: factoring, which from

$$(K_1 \vee \dots \vee K_m) \text{ infers } (K_1 \vee \dots \vee K_{i-1} \vee K_{i+1} \vee \dots \vee K_m)$$

where $i \neq j$, ρ is a renaming substitution and σ unifies $\{K_i, K_j\}$, the empty clause is derivable from every unsatisfiable matrix using the Resolution Method. Since $\sigma(K_i) = \sigma(K_j)$, only one of them is included in the resulting clause.

Although with resolution there exists a short deduction of the empty clause from our example matrix, it is evident that a blind search through all resolvents and resolvents of resolvents might involve many unnecessary inferences before that short deduction was found. Refinements of the resolution procedure have been widely studied, and many strategies for cutting down on the search time have been tried out [1,3].

4. Connection-Graph Procedure [10]

In this method, a graph structure is imposed on the matrix. Two literals L_1 and L_2 are connected in the graph if $\{L_1, \sim L_2\}$ is unifiable, and then the connection is labeled with a most general unifier. Each connection represents a possible resolution inference, and when one resolution step is chosen, the corresponding connection is deleted from the graph. Usually, the resolvent gives rise to more connections, which are then incorporated in the graph.

Now if a literal has no connection attached to it, the whole clause where it occurs, can be deleted, since no resolution step involving that clause can lead to the empty clause. When a clause is deleted, all connections attached to other literals in it are deleted too, and this can result in a chain reaction, sometimes resulting in the empty matrix which proves consistency. Returning to our example:

- (1): $P^1[fx, x]$ $\sigma_{21} = \{fb/a, b/x\}$
 (2): $\sim P^2[a, b] \vee \sim P^3[b, c] \vee G^4[a, c]$ $\sigma_{31} = \{fc/b, c/x\}$

$$(3): \quad \sim G^5[e, h()] \quad \sigma_{54} = \{e/a, h()/c\}$$

the connection graph can be represented by the most general unifiers σ_{ij} as indicated. Choosing σ_{21} and deleting the corresponding connection we get the resolvent:

$$(4): \quad \sim P^6[b_4, c_4] \vee G^7[fb_4, c_4] \quad \begin{aligned} \sigma_{61} &= \{fc_4/b_4, c_4/x\} \\ \sigma_{57} &= \{fb_4/e, h()/c_4\} \end{aligned}$$

which gives rise to the indicate new connections. But now literal 2 is unconnected, and clause 2 is deleted. Then the connection corresponding to σ_{31} and σ_{54} are deleted too, leaving only the two new connections to choose from for the next step. Choosing, and deleting, σ_{61} we get the resolvent:

$$(5): \quad G^8[ffc_5, c_5] \quad \sigma_{58} = \{ffh()/e, h()/c_5\}$$

with the indicated new connection. Now literals 1 and 6 are both unconnected, and clause 1 and 4 are deleted. Then also σ_{57} disappears, leaving only σ_{58} , which results in the empty clause as before:

$$(6): \quad \square$$

The connection graph procedure can be combined with various other refinements, and an elaborate implementation has been carried out at the Universities of Karlsruhe and Kaiserslautern [14]. For simplicity we have omitted the factoring connections and self-resolving connections which the Connection-Graph Procedure generally allows.

5. Matrix Reduction [11]

This is an iterative procedure, which in each step reduces a matrix M to two simpler matrices M_1 and M_2 as follows:

Let L_1 and L_2 be two literals in different clauses of M such that σ unifies $\{L_1, \sim L_2\}$. Then the matrix M_1 is obtained from (M) by deleting L_1 and by replacing the clause containing L_2 with the literal L_2 itself. The matrix M_2 is obtained similarly by deleting L_2 and by replacing the clause containing L_1 with the literal L_1 itself.

When applied repeatedly, this procedure grows a finite binary tree of matrices, where variables are not considered distinct between matrices. If such tree can be grown, where every leaf contains an empty clause, the original matrix is inconsistent.

To prove the unsatisfiability of a matrix M , this procedure is applied successively to composite matrices as

$$M \left| \begin{array}{c} M \\ \varrho_1(M) \end{array} \right| \begin{array}{c} M \\ \varrho_1(M) \\ \varrho_2(M) \end{array} \left| \dots \right| \begin{array}{c} M \\ \varrho_1(M) \\ \varrho_2(M) \\ \vdots \\ \varrho_k(M) \end{array}$$

where each ϱ_i replaces all variables by new distinct ones. If M is unsatisfiable, then for some k the procedure will succeed. In the grandparent example, it succeeds at $k=1$:

$$\begin{array}{ll} (2): \neg P^2[a,b] \vee \neg P^3[b,c] \vee G^4[a,c] & (4): P^6[fx_2, x_2] \\ (1): P^1[fx, x] & (6): \neg G^{10}[e_2, h()] \\ (3): \neg G^5[e, h()] & (5): \neg P^7[a_2, b_2] \vee \neg P^8[b_2, c_2] \vee G^9[a_2, c_2] \end{array}$$

Using $\sigma_{21} = \{fb/a, b/x\}$ which unifies literal 2 with the negation of literal 1, we get one matrix with an empty first clause, and the second one reads:

$$\begin{array}{ll} (1): P^1[fb, b] & (4): P^6[fx_2, x_2] \\ (2): \neg P^3[b, c] \vee G^4[fb, c] & (5): \neg P^7[a_2, b_2] \vee \neg P^8[b_2, c_2] \vee G^9[a_2, c_2] \\ (3): \neg G^5[e, h()] & (6): \neg G^{10}[e_2, h()] \end{array}$$

Here a natural choice is $\sigma_{54} = \{fb/e, h()/c\}$ which unifies literal 5 with the negation of literal 4. Again we get one matrix with an empty clause, and the other one being of the form:

$$\begin{array}{ll} (1): P^1[fb, b] & (4): P^6[fx_2, x_2] \\ (2): \neg P^3[b, h()] & (5): \neg P^7[a_2, b_2] \vee \neg P^8[b_2, c_2] \vee G^9[a_2, c_2] \\ (3): \neg G^5[fb, h()] & (6): \neg G^{10}[e_2, h()] \end{array}$$

Now applying $\sigma_{36} = \{fh()/b, h()/c\}$ which unifies literal 3 with the negation of literal 6 we get two matrices each of which has an empty clause.

6. Compactness Method [15]

As remarked in the proof of the matrix reduction method, a matrix is inconsistent if for some σ every path through $\sigma(M)$ contains a complementary pair. A set of one literal from each clause is called a path through the formula. If the above situation occurs, we then say that M is blocked by σ . Again we say that two literals L_1 and L_2 occurring in M are connected if $\{L_1, \neg L_2\}$ is unifiable. The connections of a matrix, and the corresponding unifiers, are computed once and for all.

In a matrix with r paths, a blocking substitution can be found, if it exists, as the most general unifier of the set:

$$[\{L_1, \neg L_2\}^1, \{L_1, \neg L_2\}^2, \dots, \{L_1, \neg L_2\}^r]$$

where L_1^i, L_2^i are connected literals on path i . We call these sets the characteristic sets of the matrix. There are finite-

ly many characteristic sets of a matrix. Moreover, if M is inconsistent and consists of the clauses: $(C_1, \dots, C_q)$, then there are integers $(k_1, \dots, k_q)$ such that the matrix $N = [C_1, \theta_{11}(C_1), \dots, \theta_{1k_1}(C_1), \dots, C_q, \theta_{q1}(C_q), \dots, \theta_{qk_q}(C_q)]$ is blocked by some σ , whereby the θ_{ij} are variable renaming substitutions. With little effort, the connections of N and the corresponding unifiers can be extracted from those of M . See [15] for details on this.

No a priori upper bound is available for any of the k_j , and the following procedure makes no commitment as to the relative size of k_i and k_j for $i \neq j$. Let M be as above and repeat the following indefinitely:

for $j=1, \dots, q$: If M is blocked then stop with success,
 else add a new variant of C_j to M .

If k repetitions do not result in success, then $k+1$ is a lower bound of $\max(k_1 \dots k_q)$. In a practical implementation the addition of a new variant of a clause C_j is best carried out by maintaining a representation of the paths and letting each path branch out to several, one for each literal in C_j and each one literal longer than the original.

In the grandparent example, the minimum values of k_1, k_2, k_3 are 1, 0, 0 respectively. The original matrix as given in section 2 has three paths connecting the literals: $\{1, 2, 5\}$, $\{1, 3, 5\}$, $\{1, 4, 5\}$, and it has one characteristic set consisting of: $\{2, \sim 1\}$, $\{3, \sim 1\}$, $\{5, \sim 4\}$, where we indicate only the superscripts of the literals. We immediately realize that the characteristic set has no unifier! Adding a variant of the first clause to the matrix M results in:

(1): $P^1[fx, x]$	(3): $\sim G^5[e, h()]$
(2): $\sim P^2[a, b] \vee \sim P^3[b, c] \vee G^4[a, c]$	(4): $P^6[fx_2, x_2]$

which has the paths: $\{1, 2, 5, 6\}$, $\{1, 3, 5, 6\}$, $\{1, 4, 5, 6\}$, resulting in the four characteristic sets:

$\{\{2, \sim 1\}, \{3, \sim 1\}, \{5, \sim 4\}\}$ $\{\{2, \sim 6\}, \{3, \sim 1\}, \{5, \sim 4\}\} \checkmark$
 $\{\{2, \sim 1\}, \{3, \sim 6\}, \{5, \sim 4\}\} \checkmark$ $\{\{2, \sim 6\}, \{3, \sim 6\}, \{5, \sim 4\}\}$

The first one of these four sets has already been discarded earlier, and of the remaining three, the second and the third are unifiable thus proving the 'Grandparent Theorem'.

7. Applications [1]

The AR-systems have been used in a multitude of different fields in applied and basic research to solve particular problems which require deductive reasoning and which could be phrased in FOL. We aim to give in this section a condensed overview, and in the following section we will present a few

illustrative examples. The field of AR has grown out of ATP which focused mainly on problems in pure mathematics. With the ATP-systems becoming more and more performing they were also applied to problems of different, and in particular of more practically oriented, domains. Since this process is still ongoing, the interested reader should not be surprised to find a large portion of the applications in pure mathematics, logic and computer science. Let us now briefly describe these application domains:

Thinking Problems [1,3]: The solution of puzzles such as for instance the 'Tiles plus Hole' game, the 'Checkerboard' covering by domino stones or the 'Missionaries and Cannibals' problem. As the most spectacular example we consider the 'Billiard Ball Weighing'. One out of twelve billiard balls is different in weight; it can be determined with a balance-scale by at most three weighings. The AR-system gave 40 different possible solutions.

Chemical Synthesis [16]: The problem focuses on a large database of simple compounds and a set of reaction rules that combine them to produce complex compounds.

Communication Protocols [17]: Safety properties of two transport protocols, the Stenning protocol and the 'Nano TCP' protocol, have been proved.

Assembly Language [2]: A simple assembly language for a stack machine is formalized. The book of Ref. [2] also gives a correctness proof for a function that compiles expressions into that assembly language. In the standard-benchmark section of the definitions and theorems, there is a collection that defines another simple assembly language, including "jump" and "move to memory" instructions, and it proves the correctness of a program that iteratively computes the sum of the integers from 0 to n. The correctness proof is complicated by the fact that the program instructions are fetched from the same memory being modified by the execution of the program.

Logic Circuit-Design/-Verification [1,19]: Consider the problem to design a circuit and you are asked to use only NAND-gates. The circuit has two inputs, x and y, and two outputs, y and x. The input x is above the input y, but the reverse is true for the outputs. Finally, you are required to build this circuit with no crossing wires.

For a more complex example, you are asked to build a circuit with inputs (a,b,c), and with outputs (NOT a, NOT b, NOT c). You can think of the inputs as each taking on values 0 and 1. You are permitted to use as many OR-gates and AND-gates as you wish, but no more than two NOT-gates.

As another application we mention the correctness proof of a ripplecarry-adder. The adder is a recursively defined function which maps a pair of bit vectors and an input carry-bit to a bit vector and an output carry-bit. The theorem establi-

shes that the natural number interpretation of the output is the Peano sum of the natural number interpretations of the inputs, with appropriate consideration of the carry-flags. An analogous result is proved for twos-complement integer arithmetic. The recursive description of the circuit can be used to generate an adder of arbitrary width. A 16-bit wide version has also been evaluated.

Propagate-generate and conditional-sum adders have also been proved correct. The correctness proof was found of the 'combinational logic' for a 16-bit wide-arithmetic logical unit, providing the standard operations on bit vectors, natural numbers, and integers.

Program Debugging/Verification (Automatic Programming) [1,2]: On the one hand, an AR-system can be used to assist you in checking a program and in finding bugs by carrying out symbolic executions of that program. In this use, the AR-system automates a part of the process of desk-checking a computer program. You can also attempt to prove that your program is correct - to prove that whatever the input data, if the data are valid, then the result of executing the program satisfies some specification. Finally, because proofs of even very simple programs are so complicated, it is natural to look for alternative approaches to probing programs. While such approaches are still a topic for research, the technique of automatic (or abstract) programming seems to hold great promise. As an explicit example of the above, we point to the verification-condition generator for a subset of ANSI Fortran 66 and 77 which was discussed in [18]. This paper describes the correctness proof of a Fortran implementation of the Boyer-Moore fast string searching algorithm. A correctness proof for a Fortran implementation of an integer square-root algorithm based on Newton's method can also be found in the literature, as well as a linear-time majority vote algorithm.

Real-Time Control [1,2]: As a very simple example we mention here the control of a heater by a thermostat. If several sensors and devices, to be (de)activated, are admitted and the switch-on/off conditions become complex, then this type of problems can be very difficult.

Another application consists in the control of an elevator, or the simulation of a system of serving robots in a restaurant. Real-time monitoring is important for the continuous control of (nuclear) power stations, for the monitoring of large assembly lines, a steel manufacturing plant, a petroleum distillation plant, or a chemical production system.

A simple real-time control problem is considered in Ref. 18, where the recursive definition of a "simulator" for a physical system - a vehicle attempting to navigate a straightline course in a varying cross-wind - is analysed. Two theorems are proved about the simulated vehicle: the vehicle does not wander outside a certain corridor if the wind changes 'smoothly', and the vehicle homes to the proper course if the wind stays steady for a certain amount of time.

Mathematics (Set-, Group-, Number-, ...Theory) [1,19]: As we already pointed out earlier, there are numerous applications of AR-systems in pure mathematics; we here focus on two of them. The first one concerns the possible independence of the elements of the usual set of five axioms given for a Ternary Boolean Algebra. Intuitively, the function f , that occurs in each of them, can be thought as a 3-place product, and the function g as the inverse. The problem is to determine which, if any, of the five axioms is independent of the remaining four. If an axiom is dependent, then a proof can be found of that fact. If an axiom is independent, then a model exists that satisfies the other four but does not satisfy the independent axioms. Axioms 4) and 5) were known to be independent even before proofs were obtained with two unrelated AR-programs. Now, the axioms 1), 2) and 3) are indeed independent and the required models were generated with the AR-system AURA.

The second application concerns the possible existence of a finite semi-group in which one type of mapping is present while another type is absent. Specifically, does there exist a finite semi-group admitting a non-trivial anti-automorphism, but not admitting non-trivial involutions? A non-trivial anti-automorphism is a one-to-one, onto mapping H such that $H(xy) = H(y)H(x)$ and such that H is not the identity mapping. A non-trivial involution is a non-trivial anti-automorphism whose square is the identity mapping. The model generation capacity of the AR-system cleared the issue by finding a semi-group of the desired type. The first found has order 83. With this information at hand, the natural question to ask is: What is the smallest such semi-group? The result of such an analysis with the AURA-system was a proof that the smallest semi-group of interest has order 7, and that four such non-isomorphic ones exist.

Let us point here to several other nice results in number theory. Euclid's Theorem and the existence and uniqueness of prime factorization have been proved with the BMTP-system. A version of the pigeon hole principle and Fermat's theorem, as well as Wilson's theorem could be verified. Finally, Gauss' Law of Quadratic Reciprocity has been checked.

MetaMathematics [2,19]: The soundness and completeness of a decision procedure for the propositional calculus, similar to the Wang algorithm, has been proved, as well as the soundness of an arithmetic simplifier. The Turing completeness of Pure LISP, and also the unsolvability of the halting problem could be verified. Furthermore, proofs could be obtained for the Tautology Theorem, i.e. that every tautology has a proof in Shoenfield's formal system, for the Church-Rosser Theorem and also for Goedel's incompleteness theorem.

Other Fields [19]: Due to limitations in space we can not cover all application areas. In particular we here skip the fields: Formal Logic, Diagnosis, Robotics, Expert Systems, ...

which will be touched upon in a later study.

8. Two Examples [1,3]

In this section we present in somewhat more details two examples, discussing their formulation in clausal form and giving the derivation steps.

Thinking Problem: On a certain island the inhabitants are partitioned into those who always tell the truth and those who always lie. You land on the island and meet three inhabitants: A, B, and C. You ask A: "Are you a truth-teller or a liar?". He mumbles something that you cannot make out. You ask B what A said. B replies: "A said he is a liar". C then volunteers: "Don't believe B, he's lying!". What can you tell about A, B, C?

We formulate this problem using a single predicate (Prd): $TR[...]$, that is used to indicate that a given statement is true. Furthermore, we will need a few functions (Fct):

$TR[x]$	...	Prd: x is true.
$l(x) \equiv lx$	...	Fct: x is a liar.
$t(x) \equiv tx$	...	Fct: x is a truth-teller.
$sd(x,y)$	...	Fct: person x said statement y.

The clauses of the above problem then read:

- (1) $TR[tx] \vee TR[lx]$
- (2) $\sim TR[tx] \vee \sim TR[lx]$
- (3) $TR[tx] \wedge TR[sd(x,y)] \rightarrow TR[y]$
- (4) $TR[lx] \wedge TR[sd(x,y)] \rightarrow \sim TR[y]$
- (5) $TR[y] \wedge TR[sd(x,y)] \rightarrow TR[tx]$
- (6) $TR[y] \wedge TR[sd(x,y)] \rightarrow TR[lx]$
- (7) $TR[sd(B, sd(A, lA))]$
- (8) $TR[sd(C, lB)]$

The clause (1) expresses the fact that either statement tx is true or statement lx is true or that both are true. Clause (2) pins down that everyone is either a liar or a truth-teller, but not both. The meaning of the clauses (3-6) should be clear and the clauses (7-8) simply encode the event that took place.

In order to see how an AR-system might solve this problem we apply its basic deduction mechanism. We therefore place the axioms (1-6) in the general axiom list, and the last two in the set-of-support list. There are no demodulators for this problem. Hyperresolution is the most useful inference rule. The derivation chain is given by the following list:

```

[8+3+1]      => [ 9] :   TR[1B] ∨   TR[1C]
[8+4+1+1]    => [10] :   TR[tC] ∨   TR[tB]
[7+3+1]      => [11] :   TR[sd(A,1)] ∨ TR[1B]
[10+3+7]     => [12] :   TR[tC] ∨   TR[sd(A,1A)]
[11+3+1]     => [13] :   TR[1B] ∨   TR[1A]
[11+4+1]     => [14] :   TR[1B] ∨   TR[tA]
[13+2+10]    => [15] :   TR[1A] ∨   TR[tC]
[13+4+11+13] => [16] :   TR[1B]
[16+2+10]    => [17] :   TR[tC]

```

Form these clauses we thus can conclude that B is a liar and that C tells the truth. Do we know anything about A? The answer is no. One, in fact, could run the same program two more times - once denying that A is a liar, and once denying that A is a truth-teller. In either case a proof could be obtained, so that nothing can be concluded about what A said. The above presentation of the derivation chain is only an extraction of the actual computer-run since all the generated clauses, which were subsumed by earlier clauses, were left aside.

Logic Circuit Design: Everybody is familiar with the basic building blocks of electronic networks: the AND, OR, NOT, etc. gates. The "Two-Inverter Problem" consists in the construction of a circuit with three inputs (i_1, i_2, i_3) and three outputs (o_1, o_2, o_3) such that : $o_k = \text{NOT}(i_k)$ ($k=1,2,3$), whereby only two NOT-gates are allowed.

Due to the fact that there are three inputs, meaning that there are eight combinations of the three input signals to take the values 0 or 1, all vectors contain eight components: $\hat{x} \equiv (x_1, \dots, x_8)$ (the 'hat' $\hat{}$ indicates that it is a 8-vector!). Since the number of NOT-gates ('Inverters') shall not exceed 2, we must keep track how the inverters are used. This is done with an additional parameter u at the end of the argument list of the predicates.

In the following we list the set of clauses of this problem and subsequently discuss their meaning:

- (1) $\text{OP}[\hat{x}, u] \wedge \text{OP}[\hat{y}, u] \rightarrow \text{OP}[\hat{\text{and}}(x, y), u]$
- (2) $\text{OP}[\hat{x}, u] \wedge \text{OP}[\hat{y}, u] \rightarrow \text{OP}[\hat{\text{or}}(x, y), u]$
- (3) $\text{OP}[\hat{x}, u] \rightarrow \text{OP}[\hat{\text{not}}(x), \{\text{invtab}(\hat{\text{not}}(x)), u\}]$
- (4) $\text{OP}[\hat{i}_1, u] \quad \hat{i}_1 \equiv (0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 1 \ 1 \ 1 \ 1), \quad \hat{k}_1 \equiv \text{not}(\hat{i}_1)$
- (5) $\text{OP}[\hat{i}_2, u] \quad \hat{i}_2 \equiv (0 \ 0 \ 1 \ 1 \ 0 \ 0 \ 1 \ 1), \quad \hat{k}_2 \equiv \text{not}(\hat{i}_2)$
- (6) $\text{OP}[\hat{i}_3, u] \quad \hat{i}_3 \equiv (0 \ 1 \ 0 \ 1 \ 0 \ 1 \ 0 \ 1), \quad \hat{k}_3 \equiv \text{not}(\hat{i}_3)$
- (7) $\sim \text{OP}[\hat{k}_1, u] \vee \sim \text{OP}[\hat{k}_2, u] \vee \sim \text{OP}[\hat{k}_3, u]$
- (8) $\text{EQ}[\text{and}(x, o), o] \quad (11) \quad \text{EQ}[\text{or}(x, l), l]$
- (9) $\text{EQ}[\text{and}(x, l), x] \quad (12) \quad \text{EQ}[\text{not}(o), l]$
- (10) $\text{EQ}[\text{or}(x, o), x] \quad (13) \quad \text{EQ}[\text{not}(l), o]$

We have introduced the predicate $\text{OP}[]$ and the predicate $\text{EQ}[]$, as well as the functions: $\text{and}()$, $\text{or}()$, $\text{not}()$, $\text{invtab}()$ whose

action on the vector-components is obvious. The first three clauses (1-3) encode the rules for forming the AND-, OR-, NOT-gates. The additional parameter u helps to follow the application of the NOT-gate. The curly-brackets indicate a list-function with two arguments. In the first argument is an item of the list and in the second argument is the rest of the list. The clauses (4-6) represent the input signals: $\hat{i}_1$, $\hat{i}_2$, $\hat{i}_3$. Since the proof goes by contradiction, we deny the output pattern: clause (7). The denial says that at least one of the output pattern can not be constructed. The set of demodulator clauses (8-13) defines the meaning of the 'and'-, 'or'-' and 'not'-functions on the individual components of the vectors.

The proof that the circuit with the above specifications exists is given by the negation of the assertion and the search for a contradiction. The resolution refinement is 'Hyperresolution'. In order to see how the set of clauses (1-13) works, let us examine the derivation of some clauses. For example, from the clauses (4,3) we get the new clause:

$$OP[\text{not}(i_1), \{ \text{invtab}(\text{not}(i_1)), v \}]$$

The demodulators (12,13) evaluate the action of all not-functions, and so we find:

$$OP[\hat{k}_1, \{ \text{invtab}(\hat{k}_1), v \}]$$

where $\hat{k}_1$ was defined above. From the clauses (16,1,5), with the help from the demodulators (8,9), we derive:

$$OP[\hat{k}_4, \{ \text{invtab}(\hat{k}_1), v \}]$$

This corresponds to applying an AND-gate to the input signal represented by clause (5) and combined with the output of the inverter we have installed in the preceding step.

Proceeding in this way, we can exhaustively construct all the possible output patterns, subject of the restrictions imposed by the form of the clauses (1,2), and we maintain for each one a list of how the inverters were used in its construction. If the 'Two-Inverter Problem' is solved, then the program will eventually obtain a contradiction by simultaneously considering clause (7) together with the unit clauses that contain the three output patterns we are seeking and that have the two inverters used in exactly the same way in each of the three sub-circuits. The circuit construction is finally derived from the computer output.

As usual, things are not as easy as they appear! Nevertheless, the principle we have shown here applies to a wealth of similar problems. We refrain here from going further into the details and refer to Ref. [1] for more details.

9. Summary

In this paper we have given an introduction into "Automated Reasoning (AR)". In the first part we have explained how a formula is converted from its usual form in first-order predicate logic (FOL) to its clausal form. Once the clauses are given, we can derive new clauses by the 'Resolution Procedure', the 'Connection-Graph Procedure', the 'Matrix Reduction Method' or the 'Compactness Method' in order to arrive at a contradiction proof of a conjectured statement. We explained these deduction methods and we have applied them on a simple example.

In the second part of this paper we focused on the practical applications of the AR-systems ranging from 'Thinking Problems', ... to Mathematics and MetaMathematics. One should here clearly realize, and we stress this point, that the application of the AR-systems (due to the rather high intellectual threshold) is not yet widespread. These systems have been developed into practical tools only a few years ago!

In the third part of this study we consider two quite different examples which are meant to illustrate how AR-systems reason, and not so much on which kind of problems and fields they can be applied.

What have we learnt? The solution of a problem with an AR-system is not straightforward! There are several levels of difficulties: formulation in FOL, conversion to clausal form, optimal use of the resolution methods, semi-definiteness, and so on.

If these notes have alerted the interested reader on the highly interesting questions being raised and partially also solved by the AR-systems, and if, at the same time, we were able to give an impression on the level of the difficulties, then we have achieved our goal.

Acknowledgements:

The author thanks Prof. C. Joseph and P. Minkowski for their kind interests and encouragements. The author also thanks the CERN Theoretical Physics Division, where part of this work was done, for its kind hospitality.

References

- 1) L. Wos, R. Overbeek, E. Lusk and J. Boyle,
"Automated Reasoning: Introduction and Application",
Prentice Hall (1984).

- 2) R.S. Boyer and J.S. Moore, "A Computational Logic", Academic Press, NY (1979).
- 3) B. Humpert, "Theorem Proving with First-Order Predicate Logic: I,II,III", Proc. 8th, 9th Warsaw Symposium on Elementary Particle Physics (1985, 1986), Warsaw University Press, (Ed. Z.Ajduk).
- 4) L. Löwenheim, "Ueber Möglichkeiten im Relativkalkül", Mathematische Annalen 76 (1915) pp. 447-470.
- 5) T. Skolem, "Logisch-Kombinatorische Untersuchungen über die Erfüllbarkeit und Beweisbarkeit Mathematischer Sätze Nebst einem Theorem über Dichte Mengen", Kristiania Vitenskapsselskaps Skrifter 4 (1920) pp.1-36.
- 6) J. Herbrand, "Recherches sur la théorie de la démonstration", Thèses présentées à la faculté des sciences de Paris, 1930.
- 7) P.C. Gilmore, "A proof method for quantification theory", IBM J.of Res. and Develop. 4 (1960) pp. 28-35.
- 8) M. Davis and H. Putnam, "A computing procedure for quantification theory", JACM 7 (1960) pp. 201 ff.
- 9) J.A. Robinson, "A machine-oriented logic based on the resolution principle", JACM 12 (1965) pp. 23-41.
- 10) R. Kowalski, "A proof procedure using connection graphs", Lecture Notes in Mathematics 125 (1968) pp. 207-213.
W. Bibel, "On Matrices with Connections", JACM 28 (1981) pp. 633-645.
W. Bibel, "Automated Theorem Proving", Vieweg Verlag (1982).
- 11) P.B. Andrews, "Theorem Proving via general matings", JACM 28 (1981) pp. 193-214.
- 12) R. Nossum, "Decision Algorithms for program verification", University of Oslo, (1984).
- 13) W.F. Clocksin and C.S. Mellish, "Programming in Prolog", Springer-Verlag, Berlin, (1981).
- 14) N. Eisinger and H.J. Ohlbach, "The Markgraph Karl Refutation Procedure (MKRP)", Proc. 8th Intl. Conference on Automated Deduction, Oxford, 1986.
- 15) see Ref. [12].
- 16) L. Wos, "Automated Reasoning: Real uses and potential uses", Proc. of the IJCAI Conference (1983), pp. 867-876.
- 17) see Ref. 19.
- 18) R.S. Boyer and J.S. Moore, "The Mechanical Verification of a FORTRAN Square Root Program", CSL, Report, SRI International (1981).
- 19) B. Humpert, "Applications of Automated Reasoning", (in preparation).

Two impurity Anderson model for mixed valence systems

D. Friedli and H. Beck, Institut de physique, Rue Breguet 1,
Ch - 2000 Neuchâtel.

The variational method of Gunnarson and Schönhammer is applied to the Anderson model for two f sites hybridized with a free electron band. The ground state in the Kondo limit has both f sites occupied and "bound" by the effect of hybridization. In some low lying excited states, relevant for f-spectroscopy, only one of the f-electrons is bound. This yields a fine structure in the Kondo peak which may be important in the Kondo lattice.

The particular properties of rare earths and their compounds, originating in the hybridization of atomic-like f states with the conduction band, are usually described by the Anderson Hamiltonian, given in usual notation by

$$H = H_{\text{band}} + H_f + H_{\text{hybrid}} \quad (1)$$

$$H_{\text{band}} = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon(\vec{k}) c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}\sigma} \quad (2)$$

$$H_f = \sum_{m\sigma j} \epsilon_f f_{m\sigma}^{\dagger}(j) f_{m\sigma}(j) + \frac{U}{2} \sum_j \sum_{(m\sigma) \neq (m'\sigma')} f_{m\sigma}^{\dagger}(j) f_{m\sigma}(j) f_{m'\sigma'}^{\dagger}(j) f_{m'\sigma'}(j) \quad (3)$$

$$H_{\text{hybrid}} = \sum_{j m \sigma \vec{k}} [V(\vec{k} m \sigma, j) f_{m\sigma}^{\dagger}(j) c_{\vec{k}\sigma} + \text{h.c.}] \quad (4)$$

Ground state properties and various spectral functions observable by photoemission, have recently been calculated for the "one impurity version" of H (j=1 only) by Gunnarson and Schönhammer [1]. They used a variational approach, valid in the limit of very large degeneracy N_f of the f-level. In this system the f photoemission spectrum $A(\Omega)$ shows the usual Kondo peak near the Fermi energy E_F .

The purpose of this work was to generalize this technique to the case of two impurities (j=1,2), in order to investigate the coherence effects on $A(\Omega)$, in particular on the low energy Kondo peak, and - if possible - to make some extrapolation to the Anderson lattice. The spectral function A is given by

$$A(\Omega) = \sum_{m\sigma j j'} \sum_{\Lambda} \langle \Phi_0 | f_{m\sigma}^{\dagger}(j) | \Lambda \rangle \langle \Lambda | f_{m\sigma}(j') | \Phi_0 \rangle g_{jj'} \delta(\Omega + E_{\Lambda} - E_0) \quad (5)$$

where $|\Phi_0\rangle$ and $|\Lambda\rangle$ are, respectively, ground and excited states of (1), with energies E_0 and E_Λ , and g is an appropriate weight function (we shall focus on the "on-site" contribution $j=j'$). We use the following variational form for $|\Phi_0\rangle$:

$$|\Phi_0\rangle = A[\alpha_0 + \sum_{\mu j} \beta_0(\mu j) f_{\mu}^+(j) c_{\mu} + \sum_{\mu\mu'} \gamma_0(\mu\mu') f_{\mu}^+(1) c_{\mu} f_{\mu'}^+(2) c_{\mu'}] |0\rangle \quad (6)$$

where $\mu \equiv (\vec{k}\sigma)$ and $|0\rangle$ denotes the filled Fermi sea of the conduction band. Eq.(6) is the obvious generalization of the ansatz used in [1], which should be valid for $N_f \rightarrow \infty$ and $U \rightarrow \infty$ (no double occupancy of f-levels). The relevant intermediate states $|\Lambda\rangle$ are constructed in the same way, replacing $|0\rangle$ by $c_{\bar{\mu}} |0\rangle$, i.e. a state with a hole in the band - the hole which remains after annihilation of an f-electron (for more details about the $|\Lambda\rangle$ see [1]). The Schrödinger equation yields coupled equations for the coefficients $\alpha_0, \beta_0, \gamma_0$ and $\alpha_\Lambda, \beta_\Lambda, \gamma_\Lambda$ as well as the eigenvalues E_0 and E_Λ .

The basic features of $|\Phi_0\rangle$ and $|\Lambda\rangle$ can best be discussed in the usual limit $N_f \rightarrow \infty$, $N_f \Delta$ finite ($\Delta = \pi \max(|V|^2)$), where the coefficients of (6) can be obtained analytically, using $\epsilon(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$ and a constant hybridization function V :

- (i) Ground state: $E_0 = 2\epsilon_f - 2k_B T_K$, where T_K is the single impurity Kondo temperature, i.e. there is no "interaction" between the two f-sites.
- (ii) There is a continuum of excited states $|\Lambda\rangle_{\bar{\mu},0}$ with $E_{\bar{\mu},0} = 2\epsilon_f - 2k_B T_K + |\epsilon_{\bar{\mu}}|$.
- (iii) Another family of excited states $|\Lambda\rangle_{\bar{\mu},1}$ has doubly degenerate energies $E_{\bar{\mu},1} = 2\epsilon_f - k_B T_K + |\epsilon_{\bar{\mu}}|$.

These results have a simple interpretation in the Kondo limit, where the bare ϵ_f is well below E_F : the dominant contribution to the states come from the coefficients γ , i.e. the two f-levels are occupied. In $|\Phi_0\rangle$ and $|\Lambda\rangle_{\bar{\mu},0}$ both f-electrons are "bound" by hybridization effects, the binding energy being $k_B T_K$ for each. In the states $|\Lambda\rangle_{\bar{\mu},1}$ one of these bonds is broken (there is only one $k_B T_K$ in $E_{\bar{\mu},1}$).

The full calculation (N_f finite) yields some modifications:

- (a) The energies depend on the distance d between the f-sites (effective f-f-interaction!) see e.g. fig.1.
- (b) The degeneracy of $E_{\bar{\mu},1}$ is lifted, the true eigenstates $|\Lambda\rangle_{\bar{\mu},+}$ and $|\Lambda\rangle_{\bar{\mu},-}$ being even and odd combinations (with respect to

the symmetry plane between f-sites) of states with one f-electron bound and the other unbound.

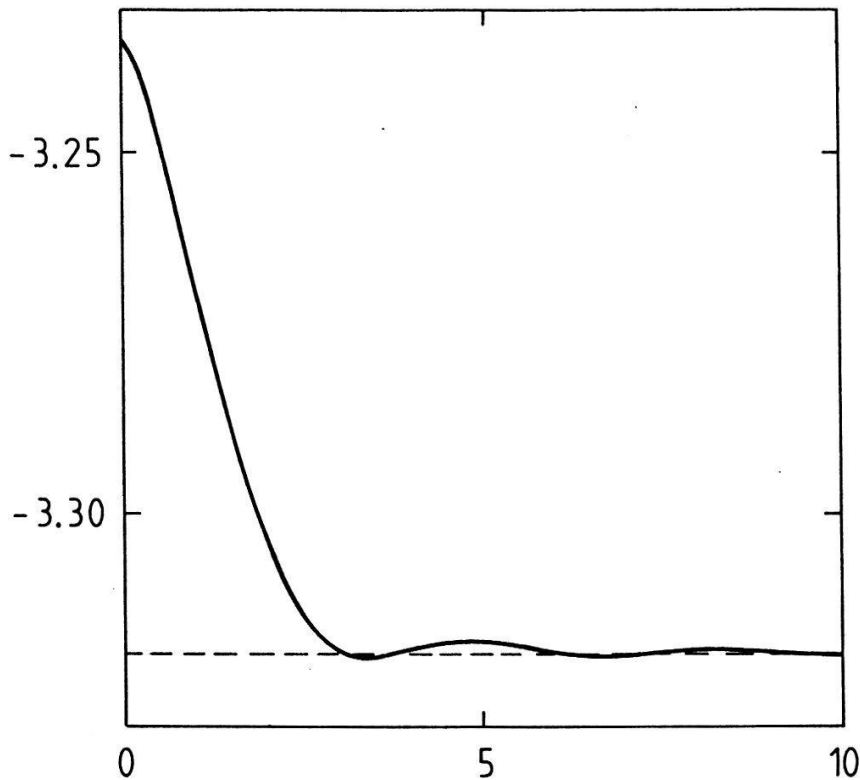


Fig. 1 : Dependence of the ground state energy E_0 (eV) on the distance (given in units of the inverse Fermi wave number k_F) between the two f-sites. Parameters used : $N_f = 6$, bandwidth : 3eV, $\epsilon_f = -1.5$ eV, $V = 0.1$ eV.

The resulting spectral function near the Fermi energy (which is at $\Omega=0$) is shown in fig.2. For $k_B T_K \lesssim \Omega < 0$ the Kondo peak (coming from the intermediate states $|\Lambda_{\bar{\mu},0}\rangle$) has the same structure as for one impurity. However, an additional fine structure, marked by an arrow in fig.2, is seen near $\Omega = k_B T_K$, coming from $|\Lambda_{\bar{\mu},+}\rangle$ and $|\Lambda_{\bar{\mu},-}\rangle$. Their weight in the spectral function turns out to be only of order $1/N_f$. Thus the spectrum for two impurities is almost the same as for one f site, at least for large N_f . On the other hand excited states of the type $|\Lambda_{\bar{\mu},+}\rangle$, with one (two, three...) out of N bonds broken, also appear in the (N -impurity) Anderson lattice, having excitation energies of the order of $k_B T_K$. Since there will now be N symmetry adapted eigenstates with one broken f-bond their contribution to $A(\Omega)$ may be more important than for $N=2$, and the Kondo peak may turn into a Kondo pseudo-gap (2). Calculations for a linear chain of impurities are in progress.

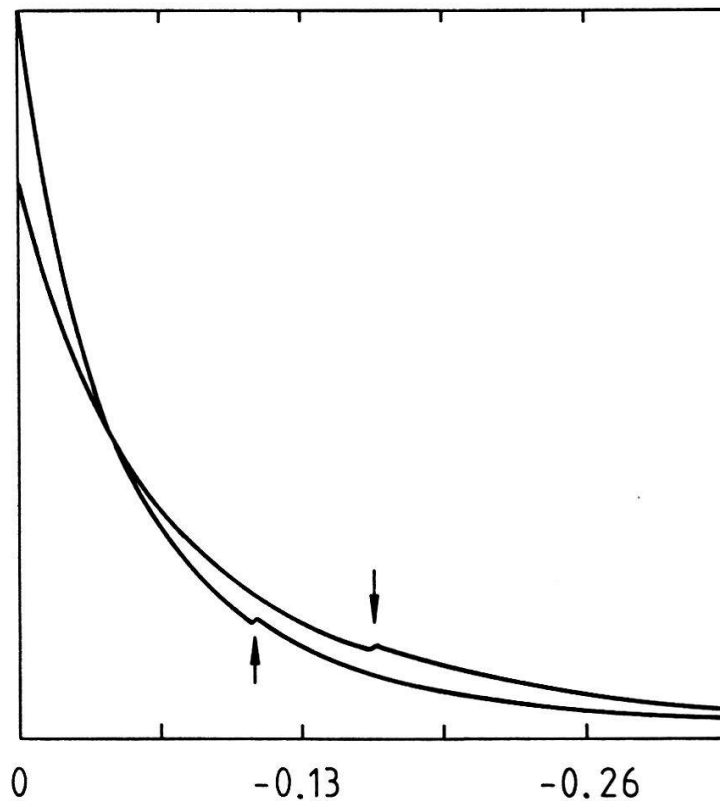


Fig. 2 : f-spectral function $A(\Omega)$, in arbitrary units, in the vicinity of the Fermi energy, located at $\Omega = 0$ (Ω in eV). Parameters used : $V = 0.1$ eV (a), $V = 0.09$ eV (b). Moreover : $\epsilon_f = -1.5$ eV, bandwidth 3 eV, distance between impurities $3k_F^{-1}$. The energies where the contributions from $|\Lambda\rangle_{\mu,\pm}$ set in, are marked by arrows.

We gratefully acknowledge valuable discussions with G. Zwicknagl and J. Wilkins. This work has been supported by the Swiss National Science Foundation.

- [1] O. Gunnarson, K. Schönhammer, Phys. Rev. B 31, 4815 (1985) and references cited therein.
- [2] N. Grewe, Solid State Comm. 50, 19 (1984).

Courants diamagnétiques quantiques

N. Macris, Ph. A. Martin

Institut de Physique Théorique, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne
CH-1015 Lausanne

On étudie les courants diamagnétiques quantiques de surface dans un système de particules en interaction à basse densité avec statistique de Maxwell-Boltzmann. Les particules sont confinées par un potentiel extérieur, ou par des parois impénétrables. On établit que la pression et l'aimantation sont indépendantes des effets de bord en limite thermodynamique. L'aimantation est donnée par l'intégrale de la densité de courant d'un système semi infini limité par une paroi plane, cette densité restant localisée au voisinage de la paroi est intégrable si le potentiel d'interaction est à suffisamment courte portée. Les preuves reposent sur une forme récente du développement de Mayer (Bridges-Battle-Federbush), la formule de Feynman-Kac-Ito et des propriétés spécifiques du "brownian bridge".

Bifurcation, stability and symmetry of nonlinear waves

S. Thiesen and H. Thomas

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

The bifurcation of wave-like spatio-temporal structures due to a hard-mode instability at non-zero wave number is investigated for a simple class of driven systems in one space dimension. We find generically a bifurcation of two branches of waves, traveling waves and standing waves, characterized by nontrivial subgroups of the symmetry group of the system. If both branches are supercritical, the wave with the larger amplitude is found to be stable. In all other cases, both waves are unstable for small amplitudes. At the common boundary of the stability regions of the two wave types in parameter space we find a bifurcation of a branch of modulated waves involving two independent frequencies, connecting the branches of travelling waves and standing waves.

Noise-induced transitions in a double-well potential:
the low friction case.

D. Ryter, Hasler AG, Research Labs, 3000 Bern 14

At low noise the transition rate admits an integral representation which is valid for the whole friction range. For moderate friction a saddle-point evaluation yields the classical Kramers result as well as the leading corrections, and for very low friction a new asymptotic result is found.

Fractional Diffusion EquationW.R. Schneider

Brown Boveri Research Center, CH-5405 Baden, Switzerland

W. Wyss

University of Colorado, Department of Physics, Boulder,
Colorado 80302, USA

Replacing the time derivative in the standard diffusion equation by the α -fractional time derivative yields the so-called fractional diffusion equation, $0 < \alpha < 1$. The associated initial value problem is solved in closed form for arbitrary space dimension in terms of Fox functions. Peculiarities in one space dimension are exhibited.

Bericht über die Herbsttagung der Schweizerischen Physikalischen Gesellschaft an der Universität Bern vom 9. und 10. Oktober 1986	171
Eichler, R.: Die B-Mesonen Fabrik (BMF), eine mögliche zukünftige Maschine am SIN	177
Wyler, D.: Particle-Physics at the BMF	178
Zinsli, P.: Die European Synchrotron Radiation Facility ESRF in Grenoble	179
Bourquin, M.: La physique des particules	180
Grieder, P.K.F.: Hochenergie – Astrophysik	181
Minkowski, P.: Computerunterstützte Forschung in theoretischer Physik	182
Fischer Ø.: Champs magnétiques intenses	183
Projet pour la création d'un Institut Romand de recherche numérique sur les matériaux (IRRMA)	184
<i>Angewandte Physik und andere Domänen</i>	
Photovoltaik I	
Curtins, H., Wyrsh, N., Favre, M., and Shah, A.V.: High rate deposition of amorphous silicon: An overview and new results	185
Veprek, S., Konuma, M., Sarott, F.-A., Ensslen, K., Curtins, H., and Iqbal, Z.: Nc-Si and A-Si: Kinetics and Mechanism of the Deposition and the Control of the Material Properties: A Review of Recent Results	185
Bugmann, G., Erni, D. et Kocian, P.: Particularités de la déposition anodique de a-Si:H dans la lueur négative d'un plasma DC de Silane / Hélium	185
Laser und Laser-Anwendungen (Sensoren)	
Sayasov, Yu.S.: Loading of the ICF-pellet induced by the ion beams and feasibility of the ion-driven ICF-concept	186
Philipona, R., Küttel, O. und Vaucher, B.G.: CO ₂ -Laser Kleinwinkel Streuexperiment zur Untersuchung von Elektronendichtefluktuationen in Plasmen	190
Bättig, R., Stierlin, R., Henchoz, P.-D., Weber, H.P.: Monostatischer faseroptischer Heterodyneempfänger	194
Beaud, P., Zysset, B., Hodel, W., Weber, H.P.: Erzeugung von 80 fsec Pulsen in einer Glasfaser durch parametrische Verstärkung und Solitoneffekt	194
Zweig, A.D., Romano, V., Weber, H.P.: Laser Schneiden in Gels als Test für Laser Chirurgie	195
Stierlin, R., Bättig, R., Henchoz, P.-D., Weber, H.P.: Reduktion von Intensitäts Noise in einem fiberoptischen balancierten Heterodyndetektions-System	195
Photovoltaik II	
Kocian, P.: DC et HF déposition des couches en a-Si:H	196
Gobet, J. und Tannenberger, H.: Elektrochemische Abscheidung von amorphem Silizium aus nichtwässrigen Lösungsmitteln bei Raumtemperatur	196
Brechet, M., Prasad, K., Wyrsh, N., Curtins, H., and Shah, A.V.: Amorphous silicon Schottky-diodes produced by a high rate silane glow-discharge decomposition method	196
Optik, Spektroskopie	
Gale, M.T., and Knop, K.: Diffractive Diffusers for Display Applications	197
Ruggiero, M., Fünfschilling, J., Stähelin, M.: Optisch nichtlineare Eigenschaften von Iodoformkomplexen	197
Wüthrich, S., Zysset, B., Weber, H.P.: Fiberoptischer Distanzsensor mit Autofokus	197
Halbleiter, dünne Schichten, Mikroelektronik I	
Ospelt, M., Henz, J., von Känel, H., Wachter, P.: Si Heteroepitaxy: RBS and XPS investigation of NiSi ₂ on Si (111)	198
Zogg, H.: Spannungsrelaxation in epitaktischem (Ba,Ca)F ₂ auf Si	201
Martin, D., Tuncel, E., Morier-Genoud, F., Staehli, J.L., Reinhart, F.K.: High quality GaAs and AlGaAs materials grown by MBE	205
Grüniger, H.R., Kern, R., Sutter, D.: Elektrochemische Abscheidung von Silizium aus dem ternären Siliziumtetrajodid, Aluminiumjodid, Lithiumjodid	209
Faist, J., Reinhart, F.K., Martin, D., Tuncel, E.: Optical phase modulation in a transfer doped GaAs-Al _x Ga _{1-x} As double hetero-structure p-n junction	209
Brunner, A.J., Oelhafen, P., and Güntherodt, H.-J.: Sputter yields of some transition-metals and transition-metal compounds from sputtering experiments with ions in the keV range	209
Stüssi, H., and Pixley, R.E.: Depth Profiling of Tritium Sources	210
Physikalische Strukturen, numerische Simulation	
Georgii, R., Hübler, A., Lüscher, E.: Extremaleigenschaften dendritischer Strukturen	211
Schmöller, A., Kropf, W., Rosenberger, A., Hübler, A., Lüscher, E.: Strukturbildung von Metallteilchen in elektrischen und magnetischen Feldern	215
Feuerecker, G., Wittmann, R., Hübler, A., Lüscher, E.: Beschreibung dendritischer Strukturen zäher Fluide	219

Kautzky, T., Hübler, A., Lüscher, E.: Rekonstruktion von Differentialgleichungen chaotischer und experimenteller Oszillatoren	222
Hübler, A., Reiser, G., Lüscher, E.: Über die Steuerung nichtlinearer Schwinger	226
Stelzel, W., Kainzbauer, H., Hübler, A., Lüscher, E.: Stationäre Zustände in berandeten, normierten Systemen	230
Dinkelacker, F., Hübler, A., Lüscher, E.: Selbststrukturierung einer Pulverschicht auf einer homogen schwingenden Platte	234
Eberl, W., Hübler, A., Lüscher, E., Maurer, M.: Quasi-numerisches Näherungsverfahren zur Umwandlung von gewöhnlichen Differentialgleichungen in Differenzgleichungen	237
Eliasson, B., and Egli, W.: Monte Carlo Simulation of Runaway Electrons in O ₂ /N ₂ Mixtures . .	241
Halbleiter, dünne Schichten, Mikroelektronik II	
Buffat, P.A., Ganière, J.-D., Reinhart, F.K.: Observation de structures a puits quantiques AlGaAs/GaAs par microscopie électronique sous incidence rasante (REM)	248
Buffat, P.A.: Advanced transmission electron microscopy in opto- and microelectronics: State of the art, current problems and possible improvements	252
Stocker, E.: High resolution electron microscopy of TiSi ₂ on doped Si	252
Med. Strahlenphysik, Energieforschung, Atmosphäre	
Mini, R.: Die Bestimmung von Beta-Dosen mittels TL-Personendosimeter (TLD)	253
Mini, R.: Die Ermittlung der Ganzkörperdosis anhand von Thermolumineszenzmessungen . . .	258
André, L., v. Arx, A., Cord, I., Garavaglia, G., Jonescu, F., Valley, J.F.: Schweizerische Empfehlungen für die Dosimetrie hochenergetischer Photonen- und Elektronenstrahlen . . .	262
Poretti, G.: Übersicht über die Strahlenbelastung des Atemapparates durch Inhalation von natürlichen Radionukliden	262
Seiler, R., Chawla, R., Gmür, K., Hager, H., Piller, G.: Messung von integralen Daten für fortgeschrittene Druckwasserreaktoren	262
<i>Physik der kondensierten Materie</i>	
Oberflächen, Grenzflächen	
Hüsser, O.E., Hulliger, F., and von Känel, H.: Electoreflectance at the BiI ₃ /electrolyte interface	263
Wiesendanger, R., Ringer, M., Rosenthaler, L., Hidber, H.R., Oelhafen, P., Rudin, H., and Güntherodt, H.-J.: Scanning Tunneling Microscopy of Metallic Glasses and Graphite	266
Aebi, Ph., Erbudak, M., Hulliger, F., Kostorz, G., Vanini, F.: EELFS-Untersuchungen der Oxidation von Eisen	266
Cornaz, A., Aebi, Ph., Erbudak, M., Stucki, F., Vanini, F.: Elektronische Übergänge in Übergangsmetallen	266
Stuck, A., Taborelli, M., Allenspach, R., Landolt, M.: Magnetisches Verhalten dünner Filme auf Ferromagneten	267
Halbleiter	
Zimmermann, B., Palmier, J.F., Py, M., Ilegems, M.: Calcul de la densité électronique dans le gaz bidimensionnel des transistors TEGFET	268
Neuenschwander, J., and Wachter, P.: Electrical resistivity of TmSe _{1-x} Te _x in function of pressure and temperature	274
Achnich, T., Py, M.A., Burri, G., Ilegems, M.: Analyse du signal d'oxygène mesuré par SIMS dans des couches d'Al _x Ga _{1-x} As	277
Py, M.A., Achnich, T., Burri, G., Ilegems, M.: Influence des paramètres de croissance sur l'incorporation d'oxygène dans des couches d'Al _x Ga _{1-x} As crûes par MBE	277
Jenny, B., und Pichat, P.: Lebensdauer von photoerzeugten Ladungsträgern in Halbleiterpulvern	277
Amorphe Metalle, Defekte	
Maglione, M., Rod, S., Höchli, U.T.: High-frequency dispersion in KTa _{1-x} Nb _x O ₃	278
Grütter, P.H., Bretscher, H., Indlekofer, G., Jenny, H., Zingg, T., Lapka, R., Oelhafen, P., and Güntherodt, H.-J.: Physical Properties of Glassy and Quasicrystalline Pd-U-Si	282
Brunner, A.J., Oelhafen, P., Güntherodt, H.-J., Compans, E., Häussler, P., Rieger, P., Bauermann, F.: Photoelectron spectroscopy on amorphous Cu-Te thin films	282
Thuillard, M., and von Allmen, M.: Etude de l'oxidation d'alliages de titane après irradiation laser	282
Blatter, A. und von Allmen, M.: Spontane Verglasung metallischer kristalliner Lösungen	283
Koch, N. und von Allmen, M.: Kalorimetrie an laserverglasten Dünnschichten: Au-Si	283
Schwander, P., Cerri, A. und Kostorz, G.: Ordnungseinstellung und Versetzungen in einer metastabilen Ni-12 at.% Ti Legierung	283
Brunner, J.: Positronenstudie von Defekten in HfN-Schichten	284
Metallurgie	
Müller, P.P., Kostorz, G., Reinhard, L., Schönfeld, B., Bühner, W.: Diffuse Neutronenstreuung an Al-Cu mit verschiedenen Cu-Isotopen	285

Klaiber, F., Schönfeld, B. und Kistorz, G.: Diffuse Röntgenstreuung an Ni-Al Legierungen . .	285
Cerri, A., Kistorz, G., Schmelzer, R. und Schönfeld, B.: Entmischung in <u>Ni-Ti</u> Legierungskristallen	285
Schönfeld, B., Kistorz, G., Klaiber, F., Reinhard, L., Bühner, W.: Nahordnung in <u>Ni-19,4 at.% Cr</u>	286
Dubey, Ph., Kistorz, G. und Schmelzer, R.: Röntgenkleinwinkelstreuung an <u>Al-3 at.% Ag-Einkristallen</u>	286
Gavillet, D., Green, W.V., Victoria, M., Gotthardt, R., Martin, J.L.: Observations in situ dans le microscope électronique à transmission du mouvement des dislocations dans l'aluminium irradié	286
Optische Eigenschaften – Phononen	
Clin, M., Rivera, J.P. et Schmid, H.: Biréfringence magnétique linéaire spontanée des boracites orthorhombiques	287
Steiner, A., Tabares-Muñoz, C. und Schmid, H.: Nachweis und Eigenschaften ferroelektrischer 180°-Domänen in BiFeO ₃ -Einkristallen	294
Marabelli F. and Wachter, P.: Far-infrared properties and electronic structure of TmSe	301
Glatz, D., Fünfschilling, J. und Zschokke-Gränacher, I.: Lochbrenn-Spektroskopie als Werkzeug zur Eliminierung inhomogener Verbreiterung	304
Solt, G. and Beck, H.: Phonon frequencies and line widths at valence fluctuations: a simple vibronic model	304
Magnetismus	
Paul, O., Furrer, A., Güdel, H.U.: Magnetische Anregungen in den eindimensionalen magnetischen Verbindungen CsMn _x Mg _{1-x} Br ₃	305
Kistorz, G., Cerri, A., Müller, P.P., Schönfeld, B. und Wright, A.F.: Bestimmung von Konzentrationsprofilen in zweiphasigen Legierungen aus dem magnetischen Anteil der Neutronenkleinwinkelstreuung	305
Schärli, M., Harbeke, G., Kiess, H., Müller, K.A., and Berlingern, W.: ESR Study on Doped Polythiophene	305
Renaud, G.-P. et Steinemann, S.-G.: Désordre thermique et fluctuations magnétiques dans les alliages invars Fe-Ni	306
Positronenspektroskopie	
Jarlborg, T., Manuel, A.A., Peter, M., Singh, A.K., Walker, E., Fisk, Z., Smith, J.L.: Fermi surfaces in TiBe ₂ through positron annihilation	307
Singh, A.K., Genoud, P., Jarlborg, T., Manuel, A.A., Peter, M., and Walker, E.: Study of electron-positron correlation in 3d transition metals	307
Hoffmann, L., Jarlborg, T., Manuel, A.A., Peter, M., Singh, A.K., Walker, E., Takei, H., and Toyota, N.: Fermi surfaces in Nb ₃ Sn through positron annihilation	307
Jarlborg, T., Manuel, A.A., Peter, M., Singh, A.K., Stephan, J.L., Walker, E., Assmus, W., and Hermann, M.: Fermi surfaces in CeNi ₅ through positron annihilation	308
Magnetismus	
Brixel, W., Steiner, A., Rivera, J.-P., and Schmid, H.: Magnetoelectric effect (ME) _H in the perovskites Pb ₂ CoWO ₆ and Pb ₂ FeTaO ₆	309
Phasenübergänge	
Sbaï, A., Kausch, H.H., Dettenmaier, M.: Small angle X-ray scattering from crazes calculated by computer simulation	310
Berset, G., Clin, M., Rivera, J.-P. et Schmid, H.: Caractérisation de la boracite Cu ₃ B ₇ O ₁₃ Br . .	315
<i>Teilchen-, Astro-, Kernphysik</i>	
Leisi, H.J., Gilot, J.-F., Goudsmit, P.F.A., Jeckelmann, B., and Thomann, S.: The pion-nucleus interaction at low energy: An alternative approach	316
Bernasconi, A. et al.: Preliminary Results from Experiment UA-6 on the Inclusive Production of π ⁰ , η, γ and J/ψ in p $\bar{p}$ and p p Interactions at $\sqrt{s} = 24.3$ GeV	317
Azam, S., Guerid, A.: Tritium breeding measurement in fusion blankets using thermoluminescent dosimeters	319
Riedlberger, J. et al.: $\bar{p}$ – Annihilation at Rest in Gaseous Deuterium	326
Vuaridel, B., Gruebler, W., König, V., Schmelzbach, P.A., Elsener, K., Ulbricht, J., Singy, D., Forstner, Ch., Bittcher, M., Bruno, M., Cannata, F., D'Agostino, M., Borbély, M.: Trinucleon D to S state asymptotic normalizations deduced from the ⁴ He($\bar{d}$, ³ He) ³ H analyzing powers and cross section measurements	326
Perny, B., Dousse, J.-Cl., Gasser, M., Kern, J., Rhône, Ch., Sujkowski, Z., Rymuza, P.: K α -Röntgenlinien mehrfachionisierter Molybdän Atome	326
Muheim, J.T.: Das Alter des Universums	327
Muheim, J.T.: Sternbildungsphasen, Bildungsgesetz, Massen von Standard-Sonne und -Planeten	332

Theoretische Physik

Humpert, B.: On the use of automated reasoning systems	338
Friedli, D., and Beck, H.: Two impurity Anderson model for mixed valence systems	353
Macris, N., Martin, Ph.A.: Courants diamagnétiques quantiques	357
Thiesen, S., and Thomas, H.: Bifurcation, stability and symmetry of nonlinear waves	357
Ryter, D.: Noise-induced transitions in a double-well potential: the low friction case	357
Schneider, W.R., Wyss, W.: Fractional Diffusion Equation	358

VISCOSUISSE

Nylsuisse und Tersuisse:
Qualitätsgarne mit Zukunft

Wir produzieren Polyamid- und Polyester-Garne mit technologisch hochstehenden, prozessgesteuerten Produktionsanlagen.

Für unsere zentrale **Forschungsabteilung** mit modernster Infrastruktur suchen wir einen

Naturwissenschaftler

oder

Verfahrensingenieur

mit abgeschlossenem Hochschulstudium (Naturwissenschaft, Chemie, Physik oder Maschinenbau) und guten Kenntnissen in EDV.

Sie sind gleichermassen interessiert an Problemlösungen im Bereich Verfahrenstechnik, an wissenschaftlicher Aufarbeitung von Versuchsreihen (math. Statistik) wie auch an EDV-Applikationen zur Überwachung und Steuerung insbesondere von Pilotanlagen.

Wir freuen uns, Ihnen unsere Firma vorzustellen und den Aufgabenbereich im Detail mit Ihnen zu besprechen. Bitte richten Sie Ihre Bewerbungsunterlagen an unsere Personalabteilung PA1.

Viscosuisse AG, 6020 Emmenbrücke
Telefon 041 50 51 51