

Zeitschrift: Helvetica Physica Acta

Band: 45 (1972)

Heft: 1

Autor: [s.n.]

Vereinsnachrichten: Rapport de la session de la Société Suisse de Physique à Fribourg, du 8 et 9 septembre 1971

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. 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. [Siehe Rechtliche Hinweise.](#)

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. [Voir Informations légales.](#)

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. [See Legal notice.](#)

Download PDF: 27.11.2024

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

Rapport de la session de la Société Suisse de Physique à Fribourg, du 8 et 9 septembre 1971

Président: Prof. E. HEER, Genève
Vice-Président: Prof. J. L. OLSEN, Zurich
Secrétaire: Prof. M. GUENIN, Genève
Membres du bureau: Prof. W. BAUMGARTNER, Zurich
Prof. K. A. MUELLER, Rüschtikon

Partie administrative

1. Membres

Les membres ordinaires suivants ont été reçus au sein de notre Société:

K. APPERT (Grandvaux), H. BECK (Effretikon), G. BONGI (Onex), M. DARWISH (Neuchâtel), M. DROZ (Genève), Ø. FISCHER (Nyon), J. J. FORNEY (Genève), B. GERBER (Neuchâtel), R. GUYE (Neuchâtel), B. HUMPERT (Genève), H. LUGINBÜHL (Neuchâtel), U. NOELPP (Bâle), J. M. NYDEGGER (Neuchâtel), A. PERREGAUX (Neuchâtel), J. F. PERROCHET (Neuchâtel), P. WACHTER (Zurich).

Donc la Société se compose de 906 membres individuels et de 35 membres collectifs.

2. Séance administrative

Le Professeur K. A. MUELLER, président du comité de rédaction des HPA est élu membre du bureau.

Le Professeur E. HEER engage la discussion au sujet des activités futures de la SSP. La SSP procédera cette année encore à une enquête sur les désirs des membres. Les résultats de l'enquête ainsi que les propositions du bureau seront présentés lors de la Session de printemps 1972.

3. Prochaine Session

La Session de printemps 1972 de la SSP aura lieu les 21 et 22 avril 1972 dans les salles de l'Université de Berne.

Physique de la matière condensée (PMC)

Superconductivity and Magnetism in some La_3X and Pr_3X Systems with Ll_2 Type Structure

by E. BUCHER, K. ANDRES, J. P. MAITA, L. D. LONGINOTTI and A. S. COOPER
(Bell Telephone Laboratories, Incorporated, Murray Hill, New Jersey 07974)

Superconductivity and magnetism have been explored in La_3X , Pr_3X and $\text{La}_3\text{X-Pr}_3\text{X}$ phases with Ll_2 type structure, for $\text{X} = \text{Al, Ga, In, Tl, Sn, Pb}$. The superconductors are characterized by very large electronic specific heats and strong coupling behavior. Pr_3In and Pr_3Sn order antiferromagnetically while all the other Pr_3X phases are ferromagnetic. For Pr_3In and Pr_3Tl it is demonstrated by superconductivity, specific heat as well as a complete phase diagram of $\text{La}_3\text{X-Pr}_3\text{X}$ that these materials exhibit a crystal field singlet ground state but order magnetically due to over critical exchange forces. Several interesting features of such systems are discussed, e.g., thermodynamic properties of singlet ions in superconductors on the La-rich side as well as the relationship between the Curie temperature and the exchange induced moment on the Pr-rich ferromagnetic side.

Metal-Insulator Behavior in Sm-Monochalcogenides

by E. BUCHER, D. B. McWHAN, R. G. MAINES and A. JAYARAMAN
(Bell Telephone Laboratories, Incorporated, Murray Hill, New Jersey 07974)

Among all divalent monochalcogenides of the rare earths, SmS is unique in that it is the only one to exhibit a first order phase transition under pressure at 6.5 kbar. Further studies were effected in the SmS-SmSe system, the latter undergoing a continuous transition. The critical pressure was found to increase almost linearly up to 80% Se where the transition becomes continuous at 34.6 kbar. The strength of the first order transition, as measured by the relative resistivity change $\Delta\rho/\rho$ at the transition, drops to 0 in a nonlinear fashion. The present situation of the metal-insulator transition in rare earth compounds suggests a refinement of the Falicov-Kimball model, taking into account dynamic effects and resonance broadening of the 4 f states into a nonmagnetic 4 f band.

Effektive Austauschparameter und magnetische Oberflächenanisotropie in EuS

von P. SCHWOB¹⁾, G. E. EVERETT und M. TACHIKI
(University of California, Riverside, Calif.)

Wir haben die Anregung stehender Spinwellen an einem hochwertigen EuS-Film zwischen 1,3 und 4,2° K untersucht. Aus dem Verlauf der ferromagnetischen Resonanz und der Spinwellenresonanzen bestimmen wir, unter Berücksichtigung der Dipol-

¹⁾ Jetzt: Centre Electronique Horloger, 2, rue A.-L.-Breguet, 2001 Neuchâtel.

Dipol-Energie, die ersten zwei Austauschparameter zu $J_1 = 0,216$ K und $J_2 = -0,123$ K. Die antiferromagnetische Kopplung zwischen übernächsten Nachbarn ist somit grösser, als bisher angenommen wurde. Sie manifestiert sich sogar in einer schwach positiven Temperaturabhängigkeit der Magnonenenergien in EuS, ein bisher unbekannter Effekt in Ferromagneten. Wir beobachten ferner an beiden Filmoberflächen dieselbe, stark temperaturabhängige, magnetische Oberflächenanisotropie.

Far-infrared emissivity of thin NaF slabs

by R. KAELIN, R. BRUSA, H. P. BALTES and F. K. KNEUBÜHL

(Solid State Physics Laboratory,
Swiss Federal Institute of Technology [ETHZ], Hönggerberg, Zürich)

We studied the spectral emission of polycrystalline NaF slabs in the wavelength region between $30 \mu\text{m}$ and $55 \mu\text{m}$ and at temperatures from 100°K to 650°K with the aid of a diffraction grating monochromator [1]. The slabs were grown by vapor deposition on a gold substrate. The thickness of the two slabs investigated were $0.5 \mu\text{m}$ and $1 \mu\text{m}$ respectively. We observed a strong, temperature-dependent emission band between $40 \mu\text{m}$ and $44 \mu\text{m}$. Figure 1 shows the temperature dependence of the resonance frequency of NaF similar to the ones of other alkali halides published by Mooij [2].

With the aid of the polarization by the diffraction grating we were able to detect a partial polarization of the emitted radiation for an angle of emission of 45° .

For the interpretation of our experimental results we applied the theory by Kliewer et al. [3] on the lattice vibrations of thin slabs. Thus we could assign the emission band to the degenerate polarized modes 1 CL^S and 2 TL^P .

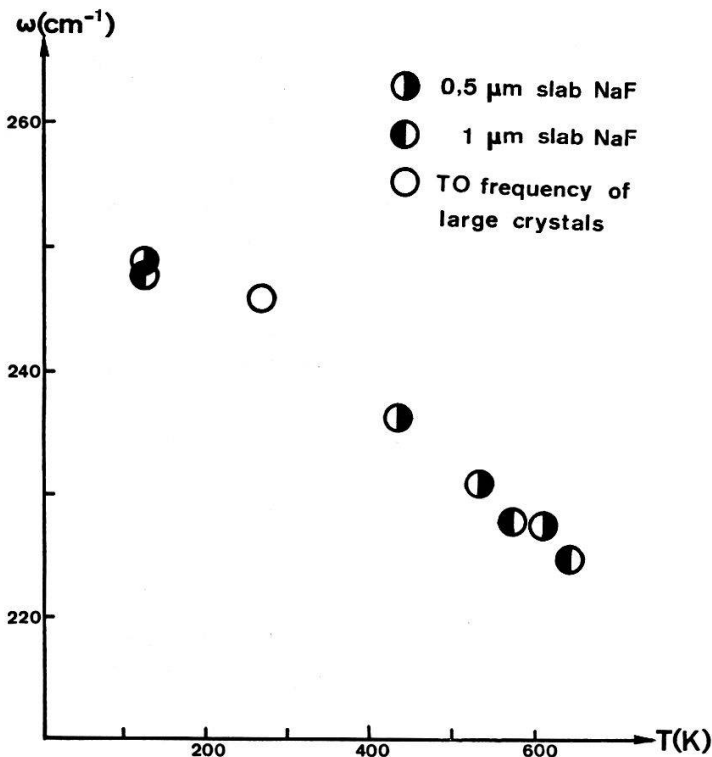


Fig. 1
Resonance frequency
vs. temperature

Acknowledgements

We wish to thank the 'Schweizerischer Nationalfonds' for financial support and Mrs. B. Kaegi for the preparation of the samples.

References

- [1] J. F. MOSER, H. STEFFEN and F. K. KNEUBÜHL, *Appl. Optics* 5, 1969 (1966); *J. Opt. Soc. Am.* 56, 760 (1966).
- [2] J. E. MOOIJ, *Lattice Resonances of Alkali Halides*, Thesis, Rotterdam University Press 1970.
- [3] K. L. KLIEWER and R. FUCHS, *Phys. Rev.* 150, 573 (1966); R. FUCHS, K. L. KLIEWER and W. J. PARDEE, *Phys. Rev.* 150, 589 (1966).

Bandstruktur und magnetische Kopplungen im metallischen GdS

VON M. CAMPAGNA, E. KALDIS und H. CH. SIEGMANN

(Laboratorium für Festkörperphysik der ETH, Zürich)

An Polykristallinen, im UHV in situ aufgedampften Schichten aus GdS wurde die Photoemission spinpolarisierter Elektronen untersucht. Durch Vergleich der Polarisation der Photoelektronen mit Messungen der Magnetisierung (F. Hulliger, private Mitteilung) ergibt sich, dass die 5 *d*-Leitungszustände eine Tendenz ferromagnetischer Wechselwirkung zeigen und somit die 4 *f*⁷-Spins des Gd nicht antiferromagnetisch koppeln können. Die Abhängigkeit der Polarisation der Leitungselektronen von der Photonenenergie kann ähnlich wie bei den 3 *d*-Ferromagneten nicht mit einem einfachen Bändermodell erklärt werden.

Comportement de matériaux magnétiques, métalliques de haute perméabilité à champs très faibles

par R. GOLDSCHMIDT

(Chaire des Télécommunications de l'EPF-L)

On a mesuré à des champs très faibles (min. 1,3 mA/m) et en fonction de la fréquence la perméabilité initiale et l'angle de pertes des tores constitués par des rubans minces.

Les mesures ont démontré la validité des relations de Jordan, mais la constate pour les courants de Foucault est plus forte que calculée théoriquement, fait déjà observé à des champs plus forts pour d'autres matériaux.

En outre, à des fréquences au-dessus de la fréquence critique, on observe une diminution de la perméabilité en fonction du champ au lieu d'une augmentation.

Magnetic Properties of Light-Rare-Earth Metals

by A. MILLHOUSE

(Delegation für Ausbildung und Hochschulforschung am Eidg. Institut für Reaktorforschung, 5303 Würenlingen, Switzerland)

Abstract. The ordered magnetic structures of heavy-rare-earth metals, as determined by neutron diffraction, are now well known. Information about magnetism in light-rare-earth metals has been lacking. During the past few years single crystal samples of light-rare-earth metals have been investigated using neutron diffraction. The results of these investigations are discussed.

1. Introduction

The light-rare-earth metals (LRM) are the series of metals: cerium (Ce), praseodymium (Pr), neodymium (Nd), promethium (Pm), samarium (Sm), and europium (Eu). A 1965 review of the magnetic properties of rare-earth metals and alloys [1] included neutron diffraction studies of Nd in single crystal form, and Eu, Ce and Pr in polycrystalline form. At present the situation is that Pr, Nd, Sm and Eu have been studied in single crystal form, whereas Ce remains studied only in polycrystalline form. Pm has not been studied. In this paper the results of neutron diffraction studies of LRM are presented. Most of these results have appeared in recent reviews [2], [3].

2. Cerium

Three crystal phases of Ce are present below room temperature in amounts which depend upon the past thermal and mechanical history of the sample. Two of these phases are face-centered-cubic and the other is double-hexagonal-close-packed (dhcp, Fig. 1). Because of the occurrence of these three phases, Ce has been studied only in polycrystalline form [4]. Antiferromagnetic ordering occurs in the dhcp phase at $T_N = 12.5^\circ\text{K}$. The ordered moment is $0.62 \mu_B$. The magnetic structure is formed by stacking ferrimagnetic layers of moments. The magnetic unit cell has a c -axis equal to that of the chemical cell and an a -axis twice that of the chemical cell.

The difficulties of producing a single crystal of dhcp Ce can be eliminated by alloying with yttrium. With as little as 15 percent yttrium in Ce the dhcp structure is stabilized at room temperature and below. This would offer an opportunity to study the magnetic structure more carefully.

3. Praseodymium

Pr has the dhcp structure at room temperature and below. A study of polycrystalline Pr showed that this metal is antiferromagnetic below $T_N = 25^\circ\text{K}$ [5], however, a more recent study found no magnetic ordering down to 4.2°K [6], [7]. In the more recent study the effect of an applied field of up to 50 KOe was investigated. The dhcp structure shown in Figure 1 consists of atoms with a hexagonal arrangement of neighbors (open circles) and atoms with a cubic arrangement of near neighbors (closed circles). With a field of 46 KOe in the (110) direction at 4.2°K it was found that

μ (hexagonal) = $1.8 \mu_B/\text{ion}$ while μ (cubic) = $0.9 \mu_B/\text{ion}$. The susceptibility with the field along the c -axis is an order of magnitude smaller than that in the basal plane. Magnon dispersion in this metal has also been measured [8], [9].

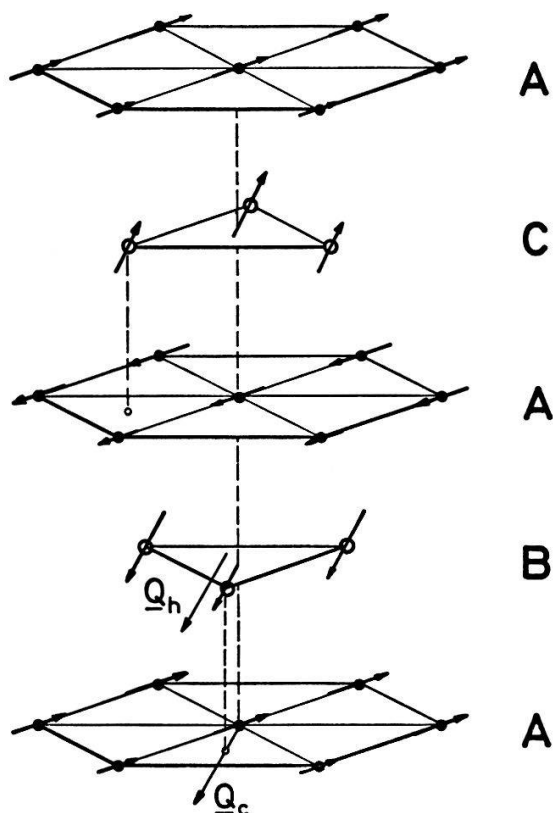


Figure 1
The Double-Hexagonal-Close-Packed Structure
(taken from Ref. [2]).

4. Neodymium

Nd has the dhcp structure at room temperature and below. Two papers on the magnetic structure as determined by neutron diffraction have appeared [10], [7]. In the latest investigation [7] the effect of an applied magnetic field is also reported.

With zero applied magnetic field the moments on the hexagonal sites order at 19.2°K according to

$$\mu_B = -\mu_C = \mu_h \hat{b}_1 \cos(Q_h \cdot R)$$

where B and C are layers of ions as shown in Figure 1. The cubic sites order at 7.5°K according to

$$\mu_A = -\mu_{A'} = \mu_c \hat{b}_2 \cos(Q_c \cdot R)$$

where A and A' are neighboring cubic layers.

5. Promethium

No magnetic studies of Pm have been made. The crystal structure has been investigated [11]. The crystal structure is dhcp with $a = 3.65 \text{ \AA}$ and $c = 11.65 \text{ \AA}$.

6. *Samarium*

A neutron diffraction study of a single crystal of ^{154}Sm has been reported [12]. The crystal structure is hexagonal but more complicated than the dhcp structure. In Sm the unit cell has a nine layer stacking sequence along the c -axis. The structure consists of atoms with both hexagonal and cubic near neighbors. At 106°K the hexagonal sites order magnetically and at 14°K the cubic sites order. A maximum in the form factor is found at $\sin\theta/\lambda = 0.45$ for the cubic sites.

7. *Europium*

A neutron diffraction study of polycrystalline Eu [13] indicated that below $T_N = 87^\circ\text{K}$ the moments are helically ordered with the spiral axes along (100) directions in the body-centered cubic crystal lattice. Recently, magnetization studies and a neutron diffraction study of a single crystal of Eu have been made [3], [14], [15].

The magnetization in zero field as found in the neutron study [14] is shown in Figure 2. The transition at $T_N = 90.5^\circ\text{K}$ is found to be first order. The structure changes caused by an applied magnetic field up to 40 KOe were also investigated

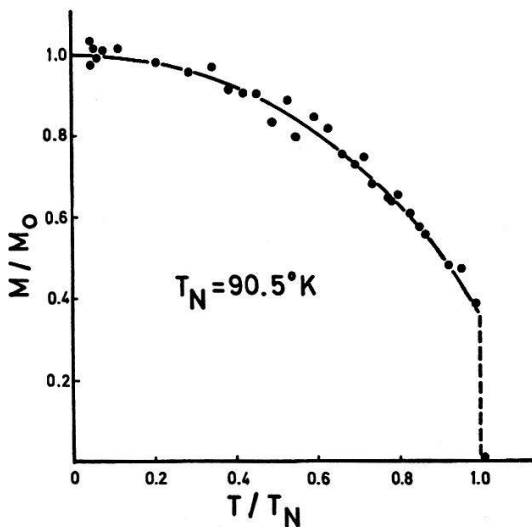


Figure 2
Reduced Magnetization of Europium vs. Reduced Temperature.

8. *Summary*

In this short report an attempt has been made to indicate the progress made in the understanding of magnetism in LRM during the past few years and to assemble the recent literature. The results of studies of crystal and magnetic structure are shown in Table 1. Of the six LRM only Ce and Pm have not been studied in single crystal form. Single crystals of LRM large enough for inelastic neutron studies are beginning to be produced. It is to be hoped that within the next few years we will have as good an understanding of the magnetic properties of LRM as we now have of the heavy-rare-earth metals.

Table 1
Crystal and magnetic structure of light-rare-earth metals.

Rare Earth	Crystal Structure	Magnetic Transition Temp.	Description of Magnetic Structure
β -Ce	dhcp, $a = 3.673 \text{ \AA}$ $c = 11.802 \text{ \AA}$	12.5°K	stacking of ferrimagnetic layers, moments parallel to c -axis
Pr	dhcp, $a = 3.672 \text{ \AA}$ $c = 11.833 \text{ \AA}$	–	no magnetic ordering to 4.2°K
Nd	dhcp, $a = 3.659 \text{ \AA}$ $c = 11.799 \text{ \AA}$	hex. moments order at 19.2°K, cubic moments order at 7.5°K	sinusoidal modulation with hex. moments parallel to b_1 , cubic moments parallel to b_2
Pm	dhcp, $a = 3.65 \text{ \AA}$ $c = 11.65 \text{ \AA}$		no magnetic studies done
Sm	nine layer hex. structure $a = 3.626 \text{ \AA}$ $c = 26.18 \text{ \AA}$	hex. moments order at 106°K, cubic moments order at 14°K	hex. moments parallel to c -axis in ferro. layers of (+ + – – ...) stacking along c -axis, cubic moments in ferro. layers parallel to (101) planes in (+ + – – ...) arrangement with moments parallel to c -axis
Eu	bcc, $a = 4.580 \text{ \AA}$	90.5°K	helix structure with spiral axes along (100) directions

References

- [1] W. C. KOEHLER, J. appl. Phys. 36, 1078 (1965).
- [2] A. R. MACKINTOSH, J. Phys. 32, C1–482 (1971).
- [3] K. A. McEWEN, Conf. Digest No. 3, *Rare Earth and Actinides* (Durham Conf., 5–7 July 1971), page 35, publ. by The Institute of Physics, 47 Belgrave Square, London SW 1.
- [4] M. K. WILKINSON, H. R. CHILD, C. J. McHARGUE, W. C. KOEHLER and E. O. WOLLAN, Phys. Rev. 122, 1409 (1961).
- [5] J. W. CABLE, R. M. MOON, W. C. KOEHLER and E. O. WOLLAN, Phys. Rev. Lett. 12, 553 (1964).
- [6] B. LEBECH and B. D. RAINFORD, J. Phys. 32, C1–370 (1971).
- [7] T. JOHANSSON, B. LEBECH, M. NIELSEN, H. BJERRUM MØLLER and A. R. MACKINTOSH, Phys. Rev. Lett. 25, 524 (1970).
- [8] B. D. RAINFORD and J. GYLDEN-HOUMAN, Ref. [3], page 40.
- [9] B. D. RAINFORD, abstract 2A–4 in program for 17th Conf. on Magnetism and Magnetic Materials, November 16–19, 1971, Chicago.
- [10] R. M. MOON, J. W. CABLE and W. C. KOEHLER, J. appl. Phys. 35, 1041 (1964).
- [11] P. G. PALLMER, and T. D. CHIKALLA, J. LESS-COMMON Metals 24, 233 (1971).
- [12] W. C. KOEHLER, abstract 4H–1, Ref. [9].
- [13] N. G. NERESON, C. E. OLSEN and G. P. ARNOLD, Phys. Rev. 135, A176 (1964).
- [14] A. H. MILLHOUSE, AF–SSP–50, Delegation für Ausbildung und Hochschulforschung am Eidg. Institut für Reaktorforschung, 5303 Würenlingen, Schweiz, July 1971.
- [15] K. A. McEWEN, P. TOUBORG, A. H. MILLHOUSE and H. BJERRUM MØLLER, to be published.

Etude par R.M.N. des alliages V_xRu_{1-x} de structure B2

par P. DESCOUTS, S. FAVRAT et J. L. PAGE

(Département de Physique de la Matière Condensée, Université, Genève)

Les résultats expérimentaux de déplacement de Knight, taux de relaxation et forme de raie sont présentés comme fonction de la température de recuit, de la température de mesure et du champ magnétique.

Deux modèles sont avancés pour expliquer les résultats observés qui ont été analysés en tenant compte de l'existence d'une transition électronique accompagnant une déformation tétragonale pour les alliages compris entre 47% et 51% de Ruthénium. Cette recherche a été financé par le Fonds National Suisse de la Recherche Scientifique.

Dendritic Growth of Spherical Crystals from Highly Supercooled Liquid Metals¹⁾

by E. MEYER and L. RINDERER

(Institut de Physique Expérimentale de l'Université de Lausanne, Switzerland)

The reported 'capillary-instability' technique is used to melt metals with any melting point and to produce small spherical samples of these metals [1], [2]. Melting and solidification is obtained (without contact with any solid) in a chemically inert atmosphere such as helium gas of 300°K–4°K or in liquid helium. In this way a very high degree of supercooling is obtained before the solidification occurs. BCC metals (W, Mo, Ta, V, Nb, quenched in He gas at 300°K) result in spherical single crystals, often with split Laue points, with a typical total width $\Delta\theta = 1^\circ \pm 0.5^\circ$, indicating a marked substructure. For most metals the surfaces of these crystals show a definite structure which is related to the $\langle 100 \rangle$ dendritic growth directions. Fe quenched in liquid He shows similar results, with $\Delta\theta = 1.5^\circ \pm 0.5^\circ$. It is concluded, that the two solid-solid phase transitions ($\delta - \gamma - \alpha$), which normally occur in Fe, have been suppressed in this case. FCC metals (Ag, Au, Cu, Ni, Pt, Pd, quenched in liquid He) showed less uniform results, varying from Pt, which was mostly single-crystalline, to Pd which was strongly polycrystalline. Ni samples contained a few crystallites; investigating the relationship between these crystallites, we obtained similar results, to those reported for Cu [3], [4].

References

- [1] E. MEYER and L. RINDERER, Phys. Lett. 28A, 677 (1969).
- [2] E. MEYER and L. RINDERER, Verhandl. DPG 5, 441 (1970).
- [3] B. L. JONES and G. M. WESTON, J. Crystal Growth 7, 143 (1970).
- [4] A. J. McLEOD and L. M. HOGAN, J. Crystal Growth 8, 61 (1971).

¹⁾ Also abstract of ICCG 3, Marseille (1971, unpublished).

Magnetische Verstärkung des Positroniumeffektes in F-Zentren in KCl

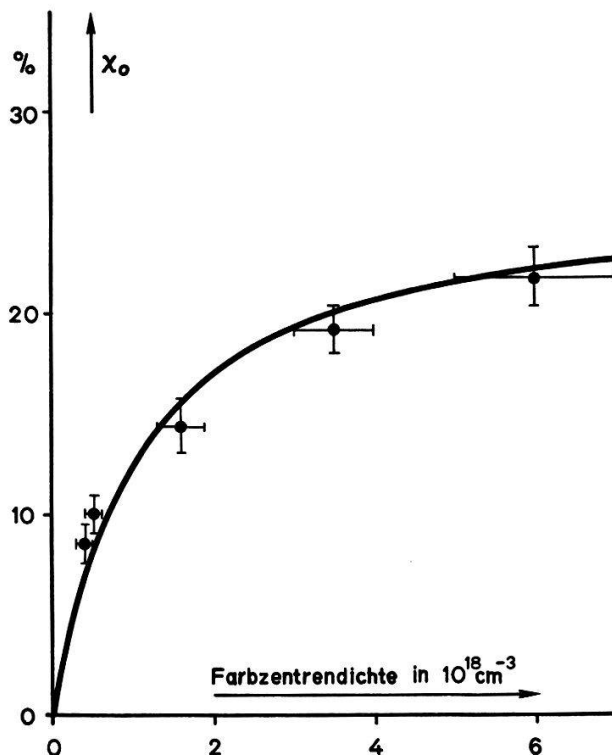
VON D. HERLACH UND F. HEINRICH

(Laboratorium für Festkörperphysik, ETH, Zürich)

In früheren Arbeiten [1], [2] konnten wir zeigen, dass in der 2 γ -Winkelkorrelation $N_0(\theta)$ von KCl eine sehr intensive, schmale Komponente $c(\theta)$ erscheint, wenn der Kristall mit F-Zentren dotiert wird. Die Form des Beitrages $c(\theta)$ lässt sich in ausgezeichneter Übereinstimmung mit den experimentellen Daten berechnen, wenn man annimmt: a) das im Farbzentrum eingefangene Positron bildet mit dem F-Elektron Positronium (Ps) oder einen Ps-ähnlichen gebundenen Zustand; b) das e^-e^+ -Paar bleibt bis zur Annihilation in der Anionlücke lokalisiert [2]. – Einen weiteren Hinweis auf Ps-Bildung liefert die Messung der Intensität $\chi_0(n) = \int c \, d\theta / \int (c + N_0) \, d\theta$ der schmalen Komponente in Funktion der Farbzentrendichte n . Der Ps-Grundzustand ist zu 1/4 mit Para-, zu 3/4 mit Ortho-Ps populiert. Im Falle des freien Ps zerfallen die Para-Zustände mit der Rate $\lambda_p = 8 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$ in zwei, die Orthozustände mit $\lambda_o = 7,15 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$ in drei Quanten. Im Festkörper tritt dazu die sogenannte «pick-off»-Rate δ in Konkurrenz (Annihilation mit Elektronen der Umgebung). Wir nehmen an, dass die pick-off-Annihilation zu $N_0(\theta)$ beiträgt. 3 γ -Zerfälle werden von Korrelationsexperimenten nicht erfasst und dürfen vernachlässigt werden, da $\lambda_o \ll \lambda_p, \delta$. Somit liefern nur die Parazustände einen Beitrag zu $c(\theta)$ mit der Intensität

$$\chi_0(n) = \frac{1}{4} \cdot W_T(n) \cdot \left(1 + \frac{\delta}{\lambda_p}\right)^{-1},$$

die in Figur 1 dargestellt ist. Die Einfangwahrscheinlichkeit $W_T(n)$ wurde nach einem Modell von Bertolaccini et al. [3] und mit $\delta/\lambda_p = 0,025$ berechnet.



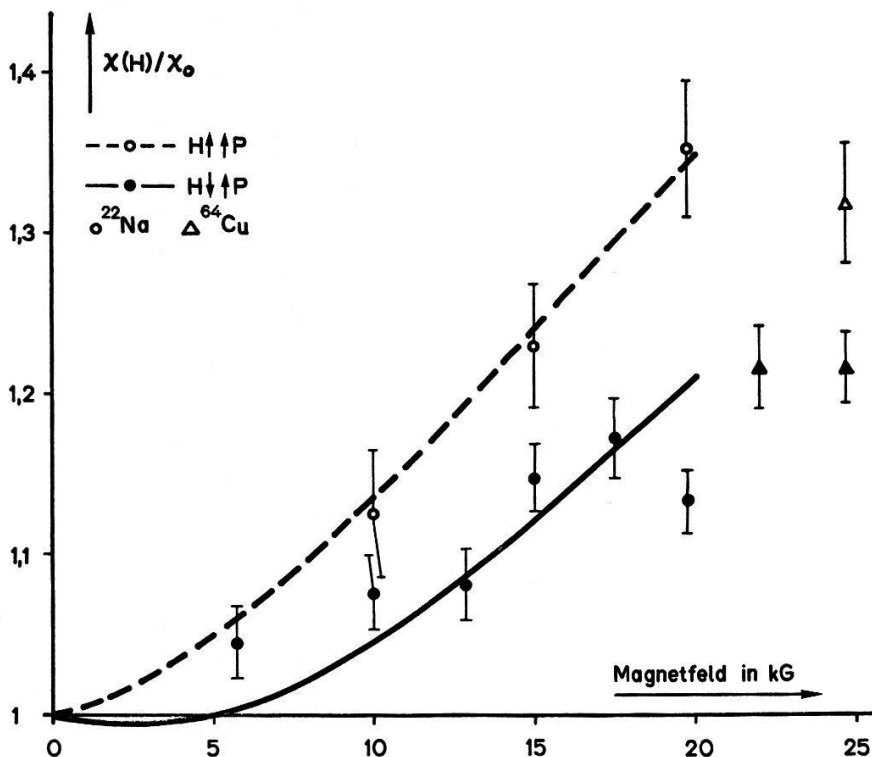
Figur 1
Intensität der schmalen Komponente.

Ein direkter Nachweis von Ps kann durch Mischung der Singulett- und Triplett-Subzustände mit $m = 0$ in einem äusseren Magnetfeld erbracht werden: Im gestörten Triplett-Zustand erscheint dann eine Singulettbeimischung mit der Rate $\lambda_p y^2/(1 + y^2)$, die einen zusätzlichen Beitrag zu $c(\theta)$ liefert. Darin ist $y = (\sqrt{1 + x^2} - 1)/x$ und $x = 4 \mu_0 H/\Delta W$. Die HFS-Aufspaltung ΔW sowie λ_p sind proportional zu $|\psi(0)|^2$; ΔW und λ_p können sich also von den Werten für freies Ps um einen konstanten Faktor α unterscheiden. Die Verstärkung von χ_0 im einen äusseren Magnetfeld wird damit

$$\frac{\chi(H)}{\chi_0} = \frac{W_T(n, H)}{W_T(n, 0)} \cdot \left(1 + \frac{\delta}{\lambda'_p}\right) \left\{ \frac{1 \pm \varepsilon P}{1 + (1 + y^2) \frac{\delta}{\lambda'_p}} + \frac{1 \mp \varepsilon P}{1 + \frac{1 + y^2}{y^2} \cdot \frac{\delta}{\lambda'_p}} \right\},$$

wobei $\lambda'_p = \alpha \lambda_p$; $\varepsilon = 2y/(1 + y^2)$, $P =$ Polarisation der Positronen. Diese Verstärkung ist grösser, wenn die mittlere Flugrichtung der einfallenden Positronen parallel zum Feld ist. Die Messdaten in Figur 2 zeigen deutlich sowohl den Verstärkungs- als auch den Polarisierungseffekt.

Die quantitative Interpretation bereitet vorläufig noch Schwierigkeiten. Neuere Lebensdauermessungen von Bisi et al. [4] an NaCl und LiF zeigen, dass auch in ungefärbten Kristallen ein Ps-artiger Zustand auftritt, der zu einer H-Abhängigkeit von W_T führen kann. Auch wir fanden bei Korrelationsmessungen an ungefärbtem KCl im Magnetfeld eine schmale Komponente, deren Form von $c(\theta)$ leicht abweicht. Leider liefert diese Messung noch keine quantitative Aussagen, weil während des Experimentes in der Probe durch Positronenbestrahlung merklich F-Zentren produziert werden. Es fehlen somit vorläufig die numerischen Unterlagen zur Berechnung von W_T . Auch die zur Berechnung von χ benötigten Werte für $N_0(\theta)$ werden durch die



Figur 2
Zunahme der
schmalen Komponente
im Magnetfeld.

Existenz dieses Ps-artigen Zustandes leicht verfälscht. Die in Figur 2 eingetragenen Kurven sind ebenso wie die von Bisi [5] unter der Annahme einer feldunabhängigen Einfangswahrscheinlichkeit berechnet. Mit den Werten $\delta = 5,6 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$ und $\alpha = 2,8$ werden unsere Messungen sowohl der Konzentrationsabhängigkeit des F-Zentreneffektes, als auch der Verstärkungs- und Polarisierungseffekte am besten wiedergegeben. Für P haben wir dabei den Wert 0,5 gewählt. Die Diskrepanz zu dem von Bisi et al. [5] gefundenen Wert $\alpha = 0,29$ könnte darauf zurückzuführen sein, dass die Einfangswahrscheinlichkeit W_T in Lebensdauer- bzw. Korrelationsmessungen verschieden eingeht. Zu detaillierten Aussagen wird man wohl erst dann gelangen, wenn bessere Informationen über den Einfangmechanismus vorliegen. Dazu muss der auch in ungefärbtem KCl auftretende Ps-artige Zustand näher untersucht werden. Wir hoffen in dieser Richtung dadurch weiterzukommen, dass wir durch Einstrahlen von Licht während des Korrelationsexperimentes die Bildung von F-Zentren verhindern.

Literatur

- [1] D. HERLACH und F. HEINRICH, Phys. Lett. 31 A/2, 47 (1970).
- [2] D. HERLACH und F. HEINRICH, Helv. phys. Acta 43/5, 491 (1970).
- [3] M. BERTOLACCINI, A. BISI, G. GAMBARINI und L. ZAPPA, J. Phys. C 4, 734 (1971).
- [4] L. ZAPPA, Private Mitteilung.
- [5] A. BISI, A. DUPASQUIER und L. ZAPPA, J. Phys. C 4, L 33 (1970).

Direkte Bestimmung der Kationen-Unordnung im MgAl_2O_4 -Spinell durch ESR

VON U. SCHMOCKER, H. R. BOESCH und F. WALDNER
(Physik-Institut der Universität Zürich)

Ein Artikel wird später veröffentlicht.

Magnetische Kernresonanz im Almandin $(\text{Fe, Mg})_3 \text{Al}_2(\text{SiO}_4)_3$

VON D. BRINKMANN und L. KAESER
(Physik-Institut der Universität Zürich)

Die magnetische Kernresonanz von ^{27}Al und ^{29}Si wurde in einem natürlichen Eisen-Magnesium-Granat [Almandin $(\text{Fe, Mg})_3 \text{Al}_2(\text{SiO}_4)_3$] gemessen. Die von den paramagnetischen Eisenionen erzeugten zusätzlichen Magnetfelder erzeugen eine Verschiebung der Al- und Si-Resonanzlinien. Die Zusatzfelder am Ort der Al folgen einem Curie-Gesetz. Sowohl für die Al- als auch die Si-Lagen besitzen die Zusatzfelder axiale Symmetrie bezüglich der Punktsymmetrieachsen dieser Lagen. Die magnetischen Konstanten dieser Felder wurden bestimmt, für ^{27}Al wurde auch die Quadrupolkopplungskonstante bei 300 und 77° K ermittelt.

Starke Austauschverschmälerung in neuen zweidimensionalen Paramagneten

von H. R. BOESCH, U. SCHMOCKER und F. WALDNER

(Physik-Institut der Universität Zürich)

und K. EMERSON und J. E. DRUMHELLER

(Departments of Chemistry and Physics, Montana State University, Bozeman, Mont. 59715)

Diese Arbeit erschien in *Physics Letters* 36 A, 461 (1971).**Compensation Effect in a β -W Structure Containing Paramagnetic Impurities**

by G. BONGI, Ø. FISCHER, H. JONES, R. FLÜCKIGER and A. TREYVAUD

(Institut de Physique de la Matière Condensée,

Université de Genève, 32, boulevard d'Yvoy, 1211 Genève 4, Switzerland)

Abstract. Following a proposition of Jaccarino and Peter [1], Fischer et al. [2] showed that it was possible to compensate the paramagnetic term $-g \mu_B \mathbf{H} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ by a negative exchange term $c \mathbf{J} \mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\sigma}$. Superconductors with the β -W structure are especially interesting from this point of view because of their high critical fields and critical temperatures. We chose to study the system $\text{Mo}_{75}\text{Os}_{25-x}\text{Fe}_x$. In this case the Fe shows an effective magnetic moment which explains in part the decrease in T_c . We see a compensation effect although the experimental curves of $H_{c2}(x, T)$ do not follow the theoretical curves of Werthamer et al. [3]. We also see an important peak effect in the magnetization curves.

It is well known that magnetic impurities have a destructive effect on the superconducting state. However, the form of the T_c vs. concentration curve depends on the nature of these impurities and their interaction with the conduction electrons, as well as their interaction with each other. Superconductors with high critical fields are particularly interesting to study since we can align the magnetic impurities in a magnetic field without destroying the superconductivity. However there are many difficulties with studying these systems. Most high field superconductors are alloys of 3d, 4d or 5d elements with a compact structure, like the A-15 structure, where it is difficult to introduce 4f magnetic ions. On the other hand the good superconducting properties are due to a high density of states, and therefore, as shown by Anderson and Wolff [4], [5] a 3d impurity loses its magnetic moment.

However, there are systems with the A-15 structure which have a relatively low density of states in spite of a high T_c and H_{c2} . Mo_3Os is such a system. We found that Fe as an impurity has an effective moment of $2 \mu_B$ while Ru and Co are essentially non-magnetic. We show in Figure 1 the critical temperature vs. impurity concentration. We see that Fe rapidly destroys superconductivity. When we approach the critical concentration we see the experimental points are below the theoretical prediction of Abrikosov and Gorkov [6]. This is a typical behavior for magnetic impurities and can be explained by correlations between first neighbors of Fe [7]. On the contrary the effect of Co and Ru on T_c is much weaker, showing a typical behavior for nearly non-magnetic impurities.

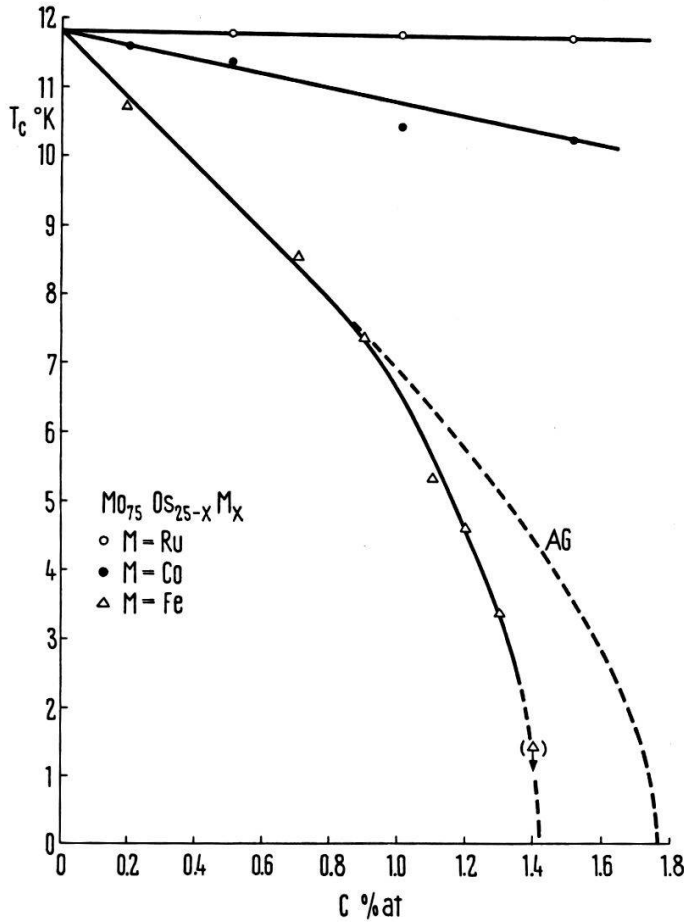


Figure 1
The critical temperature vs. concentration for $\text{Mo}_{75}\text{Os}_{25-x}\text{M}_x$ where $M = \text{Ru}, \text{Co}$ (non-magnetic) and Fe (magnetic). The dashed line is the theoretical curve of Abrikosov-Gorkov fitted at low concentration.

We have also studied the critical field for this system. In the strong spin-orbit scattering limit the equation for the critical field can be written

$$\ln \frac{1}{t} = \psi \left(\frac{1}{2} + \frac{h + \lambda_m + \left(\frac{\alpha^2 (h + h_J)^2}{\lambda_{so} - \lambda_m} \right)}{2t} \right) - \psi \left(\frac{1}{2} \right),$$

where t and h are in reduced units. λ_m is the magnetic scattering, λ_{so} is the spin-orbit scattering, α is the Maki parameter and h_J is the exchange field. If we introduce the orbital critical field h^* as the solution of this equation when $\alpha = 0$, we can write the following equation for the critical field.

$$h_{c_2}(t) = h_{c_2}^*(t) - \frac{\alpha^2}{\lambda_{so} - \lambda_m} (h_{c_2}(t) + h_J(t))^2.$$

Thus, the critical field is equal to the orbital critical field minus a correction term due to paramagnetism. This correction is small at low fields when h_{c_2} and h_J are weak, but when h_{c_2} and h_J become larger it can become important. It is also possible for the exchange field to oppose the external field. In this case the exchange field can compensate the external field so that the paramagnetic term disappears. This compensation effect was first proposed by Jaccarino and Peter [1] some years ago and seen for the first time by Fischer et al. [2]. The compensation effect appears as an anomaly in the critical field curves as shown in Figure 2 for the system $\text{Mo}_{75}\text{Os}_{25-x}\text{Fe}_x$. Consider

the $x = 1.3$ curve. The dashed curve is the calculated critical field curve neglecting the compensation effect. The anomalous temperature dependence of the critical field is due to the compensation of the paramagnetic effect since there is compensation only when the external field H is equal to H_J , the exchange field. For lower external fields the paramagnetic term is large and the critical field H_{c_2} is strongly reduced.

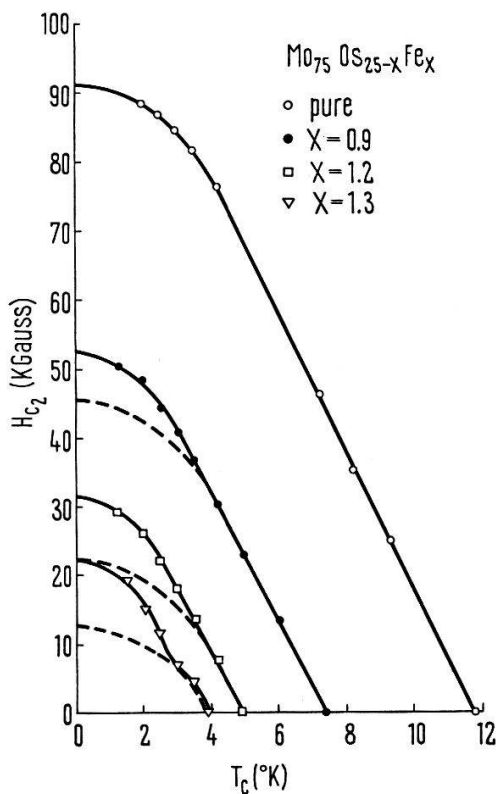


Figure 2
The critical field vs. temperature. Notice the beginning of the compensation effect at $x = 1.3$.

The magnetism of the Fe ions can also be seen in the magnetization curves. It is well known that if the lattice contains defects which have a dimension comparable to the coherence length the flux lines can be strongly pinned to these defects, giving an irreversibility of the magnetization curves $M(H)$. Normally magnetic impurities do not produce these defects in the lattice. However, superconductivity is completely or partially destroyed in a region of dimension around each magnetic impurity. This is therefore a very favorable region for the flux lines and we can expect to see the irreversible properties of the magnetization due to the magnetic impurities, especially if there are very few non-magnetic defects. This is the case for $\text{Mo}_{75}\text{Os}_{25-x}\text{Fe}_x$ as shown in Figure 3. The magnetization is in arbitrary units but the scale for Mo_3Os is twice as sensitive as the others. For the pure sample the magnetization near the critical field is very weak. However an important peak effect always appears just before H_{c_2} . This can be understood in terms of the argument given by Pippard [8]. Far away from H_{c_2} the repulsion between flux lines is very strong and the flux line lattice with a weak magnetization. When we approach H_{c_2} these forces decrease and at a certain field near H_{c_2} it is energetically more favorable for the flux lines to take an irregular arrangement de-

terminated by the local variations of the order parameter. Since the flux line lattice is now more rigid against variation of the external field the magnetization $M(H)$ will increase. Finally, when we are near H_{c_2} the magnetization must decrease again and disappear at H_{c_2} . In Figure 3 we have also shown the magnetization curves for samples with Co and Ru. We see in the two cases a very small peak effect compared to that of Fe even though the concentration of Co and Ru is twice that of Fe. Also, the effect is stronger for Co than for Ru, consistent with the fact that Co has a stronger effect on T_c .

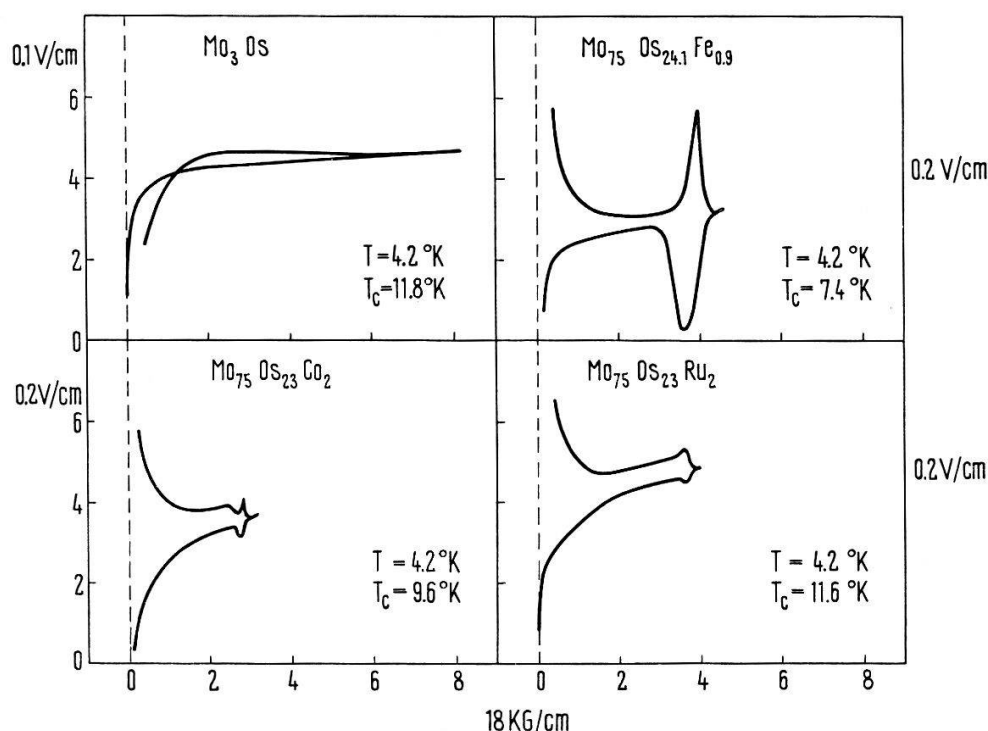


Figure 3

Magnetization curves for $\text{Mo}_{75}\text{Os}_{25-x}\text{M}_x$ system. The scale for the pure sample is one half that of the others. An important peak effect appears for Fe.

Conclusion

We have seen that the compensation of the paramagnetic effect appears at relatively high concentrations of Fe, indicating that the exchange energy J is relatively low. However, in the A-15 structure the superconductivity is believed to be due to the chains of A-atoms (in this case Mo) on the cube faces while the B-atoms (Os) go onto the corners of the cube. We are not sure whether all the impurity ions go onto the chains or in the corners of the cube. By studying the critical field, the exchange field and the critical temperature as a function of crystal order we expect to get more information about the magnetic scattering parameter, correlations between the magnetic impurities and the importance of the non-magnetic part of the scattering by the magnetic impurities. This work is in progress and will be published soon, along with a more detailed study of the peak effect.

References

- [1] V. JACCARINO and M. PETER, Phys. Rev. Lett. 9, 290 (1962).
- [2] Ø. FISCHER, G. BONGI, H. JONES, C. FREI and A. TREYVAUD, Phys. Rev. Lett. 26, 305 (1971).
- [3] N. R. WERTHAMER, E. HELFAND and P. C. HOHENBERG, Phys. Rev. Lett. 147, 295 (1966).
- [4] P. W. ANDERSON, Phys. Rev. 124, 41 (1961).
- [5] P. A. WOLFF, Phys. Rev. 124, 1030 (1961).
- [6] A. A. ABRIKOSOV and L. P. GORKOV, Soviet Phys. JETP 12, 1243 (1961).
- [7] H. JONES, Ø. FISCHER, G. BONGI and A. TREYVAUD, to be published.
- [8] A. B. PIPPARD, Phil. Mag. 19, 217 (1969).

Metallische Leitfähigkeit in einer Dimension in $K_2Pt(CN)_4Br_{0,3} \cdot 2,3 H_2O$

von D. KUSE und H. R. ZELLER

(Brown Boveri Forschungszentrum, Baden)

Einkristalle der Verbindung $K_2Pt(CN)_4Br_{0,3} \cdot 2,3 H_2O$ enthalten parallele lineare Ketten aus übereinandergestapelten ebenen quadratischen $Pt(CN)_4$ -Gruppen [1]. Wir haben die optischen Reflexions- und Transmissionsspektren und die elektrische Leitfähigkeit solcher Kristalle gemessen. Aus den Ergebnissen schliessen wir, dass die Kristalle bei optischen Frequenzen parallel zur Kettenrichtung metallisch leitend, senkrecht dazu isolierend sind. Den halbleiterähnlichen Gleichstromwiderstand schreiben wir Kristallbaufehlern zu, die die leitenden Ketten unterbrechen und erst bei hohen Frequenzen kapazitiv überbrückt werden.

Literatur

- [1] K. KROGMANN und H.-D. HAUSEN, Z. anorg. allg. Chem. 358, 67 (1968).

Plasma- und Gitterschwingungen in Gd-dotiertem EuO

von H. BALTES, G. GÜNTHERODT, E. KALDIS und P. WACHTER

(Laboratorium für Festkörperphysik der ETH, Zürich)

An Gd-dotierten Einkristallen von EuO wurde der Einfluss der Dotierung auf die Plasmaresonanzschwingung der freien Ladungsträger und auf die Gitterschwingungen untersucht. Die effektive Gd-Konzentration variierte von 0,5 bis 5,6 At%. Gemessen wurde das Reflexionsvermögen bei Zimmertemperatur im Spektralgebiet von 2,5 bis 50 μ .

Zur eindeutigen Identifizierung der Plasmaresonanz wurde die Reststrahlbande von undotiertem EuO bei Zimmertemperatur gemessen. Unsere Messung ist in guter Übereinstimmung mit derjenigen von Axe [1]. Mit der Dotierung zeigt die gesamte Reststrahlbande eine gewisse Verschiebung zu kürzeren Wellenlängen und eine zusätzliche Struktur. Inwieweit hierbei sogenannte «local» oder «band modes» einer defekt-induzierten Einphononabsorption eine Rolle spielen ist noch unklar. Auf der kurzwelligen Seite der Reststrahlbande tritt zusätzlich zum Reflexionsminimum der Bande ein weiteres, eindeutig unterscheidbares Minimum der Reflexion auf, das sich mit zunehmender Dotierung nach kürzeren Wellenlängen verschiebt und der benach-

barten Plasmaresonanz zugeschrieben wird. Denn für Wellenlängen grösser als die des Minimums zeigt die Reflexion einen starken Anstieg, die sogenannte Plasma-reflexionskante. Nach der klassischen Dispersionstheorie ergibt sich die Wellenlänge des Reflexionsminimums als reziprok proportional zur Wurzel aus der Ladungsträgerkonzentration, was die Verschiebung des Minimums zu kürzeren Wellenlängen mit zunehmender Dotierung erklärt. Die Verschiebung des Minimums ist gross zwischen 0,55 und 1,25 At% Gd und bedeutend kleiner für die höheren Konzentrationen. Dies lässt zwei verschiedene Einbaumechanismen des Gd vermuten, da oberhalb 1,25 At% Gd die Zahl der freien Ladungsträger nicht proportional zur Dotierung zunimmt. Diese Annahme wird gestützt durch den Verlauf der Gitterkonstante in Funktion der Dotierung. Die Gitterkonstante nimmt vom undotierten EuO bis zur Dotierung mit 1,25 At% Gd ab und nimmt für die höheren Dotierungen wieder langsam zu. Analog zeigt auch die effektive Dotierung gegenüber der nominellen zwei verschiedene Löslichkeitsgebiete oberhalb und unterhalb der effektiven Dotierung von 1,25 At% Gd, was wiederum auf zwei verschiedene Einbaumechanismen des Gd hinweist. Da bei den vorliegenden Substanzen im Gebiet der Plasmaresonanz die Dämpfung der freien Ladungsträger vergleichbar ist mit der Lichtfrequenz, können wir die Hagen-Rubens-Beziehung für die Beschreibung der Reflexion anwenden und erhalten z. B. für eine Dotierung von 0,55 At% Gd eine Leitfähigkeit von $\sigma = 0,9 \cdot 10^2 \Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$. Aus der Leitfähigkeit und der Position des Reflexionsminimums haben wir nach der klassischen Dispersionstheorie die Stosszeit der freien Ladungsträger zu $\tau = 0,5 \cdot 10^{-14}$ sec bestimmt.

Literatur

- [1] J. D. AXE, J. Phys. Chem. Solids 30, 1403 (1969).

Néeltemperaturen von CeSb-Verbindungen bei kleinen Änderungen der Gitterkonstanten

VON M. LANDOLT und O. VOGT

(Laboratorium für Festkörperphysik der ETH, Zürich)

An den antiferromagnetisch ordnenden Mischkristallen $\text{Ce}_x\text{Y}_{1-x}\text{Sb}$ und $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Sb}$ wurde die Abhängigkeit der Néeltemperaturen von der Ce-Konzentration x bestimmt. Für beide Verdünnungsreihen findet man grosse Abweichungen vom auf Grund der Molekularfeldtheorie erwarteten linearen Zusammenhang zwischen Néeltemperatur und Konzentration, die auf eine sehr starke Abhängigkeit der Austauschwechselwirkung von der Gitterkonstanten hindeuten. Messungen unter hydrostatischem Druck an $\text{Ce}_{0,8}\text{La}_{0,2}\text{Sb}$ zeigen [1] eine grosse nichtlineare Druckverschiebung der Néeltemperatur bei relativ kleinen Drucken: $dT_N/dp = 1,9^\circ \text{ K/kbar}$ bei $p = 0,1 \text{ kbar}$ und $dT_N/dp = 0,7^\circ \text{ K/kbar}$ bei $p = 2,5 \text{ kbar}$.

Literatur

- [1] S. JAAKKOLA, M. LANDOLT und S. PARVIAINEN, erscheint demnächst.

Hochauflösende Photoemissions-Messungen an EuO

von P. COTTI und P. MUNZ

(Laboratorium für Festkörperphysik der ETH, Zürich)

Mit einem neuen, hochauflösenden Photoemissions-Spektrometer wurden frühere Messungen an den Europium-Chalkogeniden [1] [2] fortgesetzt bis ins Gebiet des Vakuum-Ultravioletten.

Im Gegensatz zu anderen Messungen [2] wird gezeigt, dass es sich bei den Anregungen aus dem p -Band um KNIMP-Übergänge handelt. Deshalb kann auch im Bereich der p -Bänder direkt eine optische Zustandsdichte angegeben werden.

Im weiteren wurde der Einfluss der Dotierung mit Gd auf die Bandstruktur von EuO untersucht. Dabei lässt sich ein Donatorband im Bereich der Energielücke klar nachweisen.

Literatur

[1] G. BUSCH, P. COTTI und P. MUNZ, Solid State Commun. 7, 795 (1969).

[2] D. E. EASTMAN, F. HOLZBERG und S. METHFESSEL, Phys. Rev. Lett. 23, 226 (1969).

Austausch-induzierte Störstellenionisation in Gd-dotiertem EuO

von E. KALDIS, J. SCHOENES und P. WACHTER

(Laboratorium für Festkörperphysik der ETH, Zürich)

An Gd-dotierten EuO-Einkristallen wurde die optische Absorption und die Faraday-Rotation von gebundenen und freien Ladungsträgern in Funktion der Temperatur untersucht. Durch Lichtstreuung an ferromagnetischen Domänen konnte die Curie-Temperatur von 0,66% Gd-dotiertem Material zu 85°K bestimmt werden. Die optisch bestimmte Energielücke, entsprechend einem Übergang $4f^7-5d_{2g}$, ist für diese Dotierung kleiner als für undotierte Proben. Beim Abkühlen unterhalb T_c beobachtet man eine Rotverschiebung der Absorptionskante, die aber um 10% kleiner ist als bei reinem EuO. Aus dieser Rotverschiebung kann die Spin-Korrelationsfunktion abgeleitet werden und daraus der magnetische Anteil der spezifischen Wärme. Aus der Absorption und der Faraday-Drehung der freien Ladungsträger können unter Zuhilfenahme der Plasma-Resonanz die für eine Transporttheorie wichtigen Parameter N , μ und m^* bestimmt werden. Die Beweglichkeit hat ein Minimum bei T_c . Die thermische Aktivierungsenergie der Ladungsträger beträgt $E_D \approx 0,03$ eV für $T \gg T_c$ und etwa 10^{-4} eV für $T \ll T_c$. In der Nähe und knapp unterhalb T_c ändert sich durch Austauschspaltung von Donator und Leitungsband die Aktivierungsenergie des Donators besonders stark, so dass eine austauschinduzierte Ionisation der Störstellen und eine Zunahme der Ladungsträger beobachtet wird.

Kristallfeldeffekte in $\text{Ce}_{0,25}(\text{Y, La})_{0,75}\text{Al}_2$

VON H. G. PURWINS, E. WALKER, P. DONZÉ UND A. TREYVAUD

(Département de Physique de la Matière Condensée, Université Genève)

und A. FURRER

(Delegation für Ausbildung und Hochschulforschung, Eidg. Institut für Reaktorforschung, Würenlingen)

und J. KJEMS

(A.E.C. Research Establishment Risø, Roskilde, Dänemark)

Die Kristallfeldniveaus von Ce^{3+} in $\text{Ce}_{0,25}(\text{Y, La})_{0,75}\text{Al}_2$ wurden mit Hilfe inelastischer Neutronenstreuung bestimmt. Mit den gemessenen Kristallfeldniveaus wird die Suszeptibilität berechnet und mit der gemessenen Suszeptibilität verglichen. Das Punktladungsmodell wird für $\text{Ce}_{0,25}(\text{Y, La})_{0,75}\text{Al}_2$ diskutiert. (Einzelheiten der Messungen werden andernorts veröffentlicht.)

Etat relaxé de l'exciton auto-piégé dans CsI

par H. LAMATSCH, J. ROSSEL et E. SAURER

(Institut de Physique, Université de Neuchâtel)

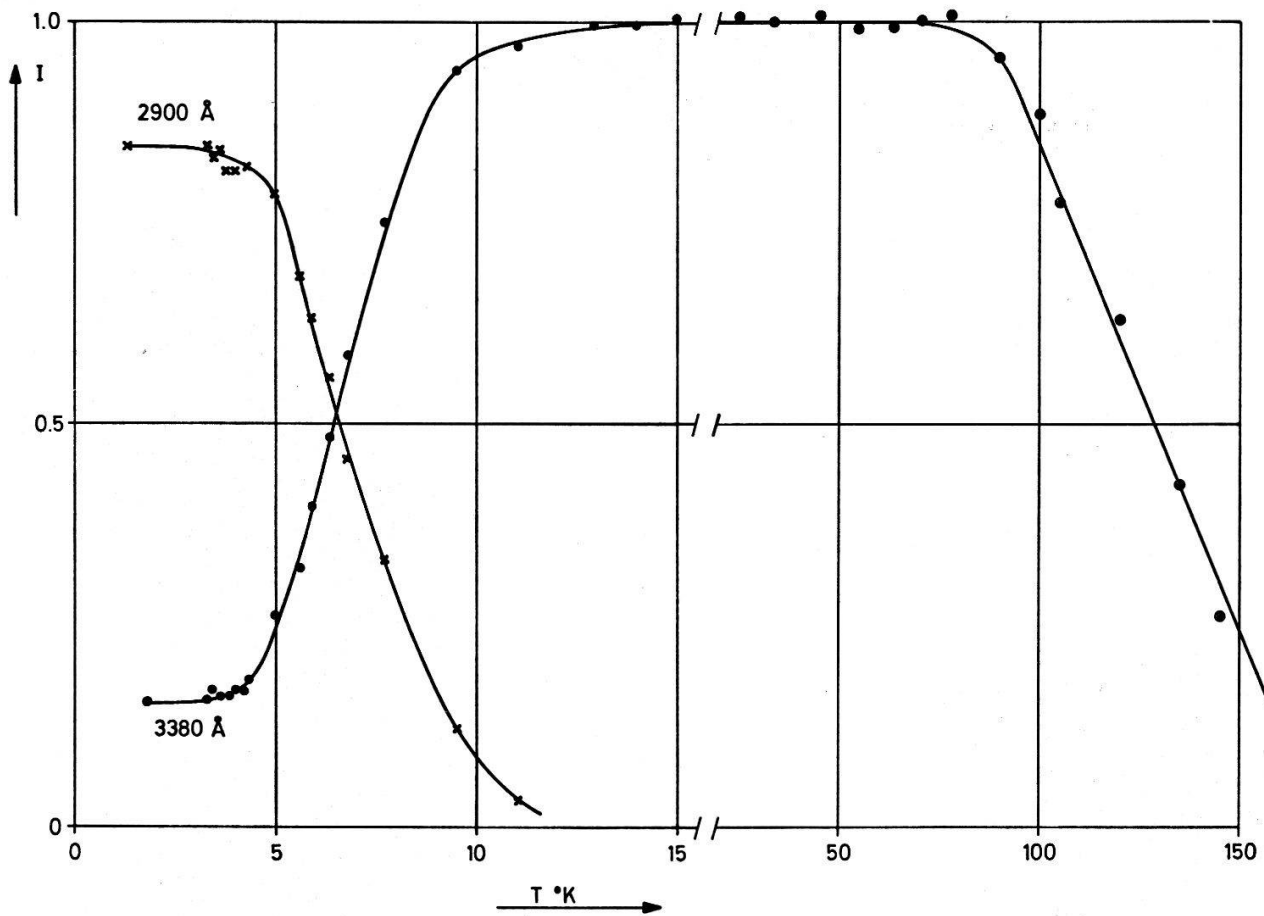
La structure cubique simple de CsI implique une relaxation de l'excitation qui peut être différente des halogénures alcalins de structure f.c.c. où l'axe privilégié est le même que pour le centre V_K , soit uniquement les 6 diagonales des faces $\langle 110 \rangle$ [1].

Dans CsI on doit s'attendre à une direction $\langle 100 \rangle$ mais également $\langle 110 \rangle$ et même à un passage de l'une à l'autre sans empêchement stérique marqué.

Nous avons étudié les caractéristiques spectrales de l'émission et la cinétique de recombinaison dans des monocristaux de CsI entre 1°K et 150°K .

- a) par irradiation UV dans les 3 bandes excitoniques;
- b) par irradiation ionisante (β de ^{90}Sr) et
- c) par une stimulation IR de cristaux dotés (Ca^{++} , Sr^{++}), préalablement irradiés pour $T < 50^\circ\text{K}$, qui libère des électrons trappés et produit un état excitonique relaxé par l'association $V_K + e$. La loi de déclin a été étudiée pour les mêmes irradiations mais en régime pulsé (β isolés et pulses UV et IR de $\sim 5 \cdot 10^{-9}$ s).

Deux bandes d'émission de forme gaussienne sont observées à 290 et 338 nm; leur comportement entre $T = 1^\circ\text{K}$ et 15°K et jusqu'à 150°K ainsi qu'un exemple de la loi de déclin temporel sont présentés dans les figures 1 et 2. La complémentarité et le caractère séquentiel des deux émissions, la forme gaussienne observée pour ces bandes ainsi que la variation du temps de déclin $\tau(T)$, toutes caractéristiques qui sont essentiellement les mêmes pour les 3 types d'irradiation, suggèrent un modèle en courbes de configuration avec les niveaux relaxés de la figure 3. Les prédictions de ce modèle, où chaque niveau a une vie moyenne du type $1/\tau = 1/\tau_0 + S \exp(-E/kT)$, sont complètement en accord avec l'expérience et permettent de déterminer les valeurs $E_1 = (5,4 \pm 0,5)$ eV et $E_2 = (0,11 \pm 0,01)$ eV.



Rendement de l'émission excitonique de CsI à basse température

Figure 1

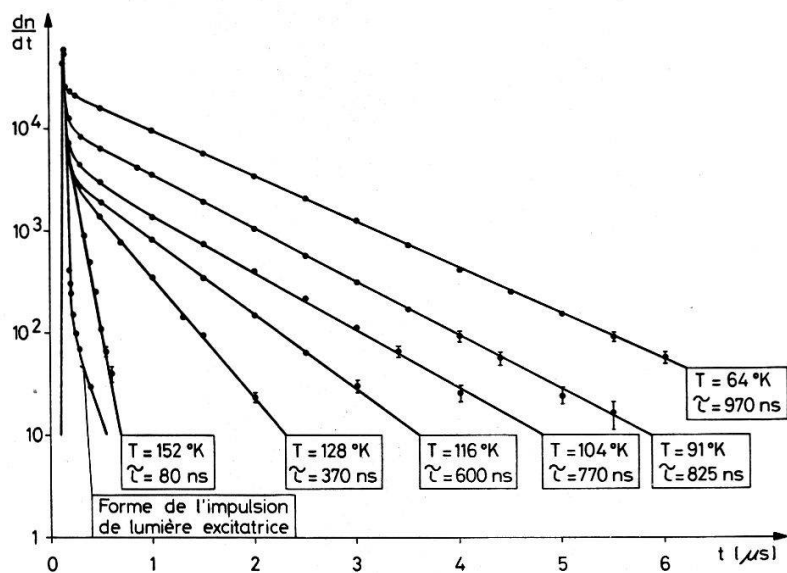


Figure 2

Le doublet dans le second état relaxé (non résolu en émission) de séparation ΔE et de rapport de multiplicités $D = g''/g'$ doit être postulé pour pouvoir rendre compte de la loi $\tau(T)$ observée entre 10 et 150° K. Admettant un équilibre de Boltzmann entre les 2 niveaux, on obtient un «fit» optimum qui s'adapte très exactement aux points expérimentaux (fig. 4).

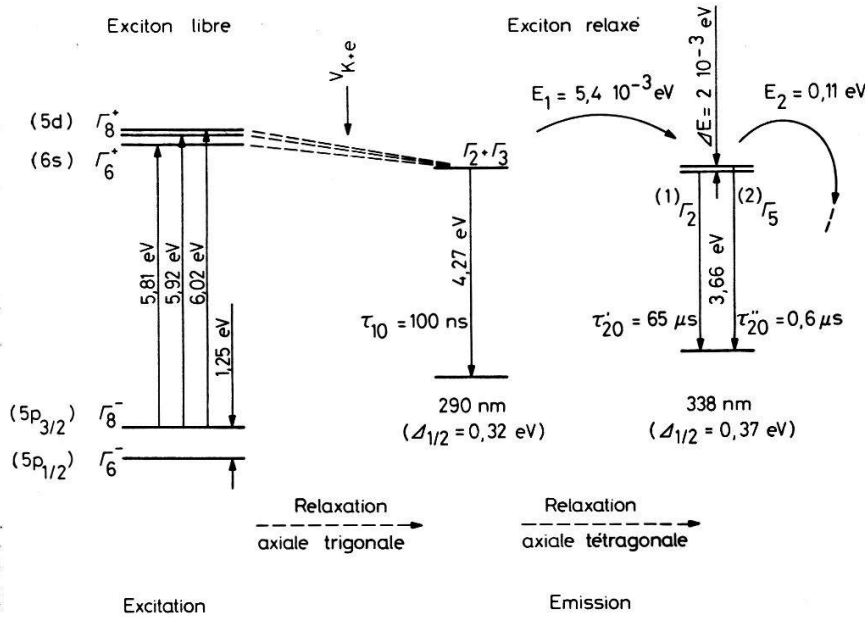


Figure 3

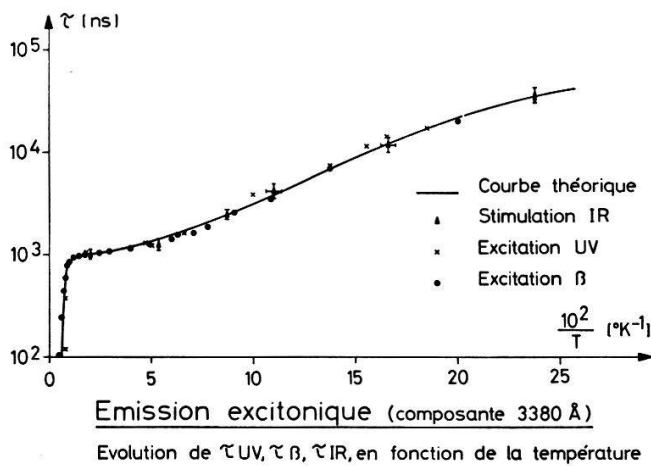


Figure 4

Les valeurs ainsi trouvées pour les paramètres sont $\Delta E = (2,0 \pm 0,2) 10^{-3} \text{ eV}$ et $D = 2,2 \pm 0,4$ (valeur la plus récente) [2]. Ces résultats sont résumés dans la figure 3.

La symétrie cubique Γ_{15} de l'exciton libre se transforme en une symétrie trigonale $\Gamma_2(1)$ et $\Gamma_3(2)$ par relaxation axiale suivant $\langle 110 \rangle$ et en une symétrie tétragonale $\Gamma_2(1)$ et $\Gamma_5(2)$ par relaxation suivant $\langle 100 \rangle$. Les transitions à l'état fondamental Γ_1 relaxé sont permises à partir de $\Gamma_2 + \Gamma_3$ dégénérés dans le premier stade de relaxation (bande 290 nm). Dans le second stade caractérisé par le doublet Γ_2, Γ_5 , séparé et avec $D = 2$, la transition dipolaire $\Gamma_5 \rightarrow \Gamma_1$ est permise tandis que $\Gamma_2 \rightarrow \Gamma_1$ est interdite au premier ordre (bande 338 nm). Ceci expliquerait les valeurs observées $\tau'_{20} = 65 \mu\text{s} \gg \tau''_{20} = 0,6 \mu\text{s} \sim \tau_{10} = 0,1 \mu\text{s}$.

L'état $V_K + e$ devrait correspondre au premier stade de relaxation trigonale (axe $\langle 110 \rangle$) et la réorientation suivant $\langle 100 \rangle$ au second stade.

Une étude de la polarisation de la lumière émise et du dichroïsme des niveaux a été entreprise pour clarifier ces points. En irradiant dans les bandes d'absorption associées aux trous piégés [3] avec de la lumière polarisée suivant $\langle 100 \rangle$ on observe une réorientation des V_K . Ces mesures sont en progrès.

Il apparaît plausible que dans CsI la relaxation soit différente pour les trous autopiégés et pour les excitons, au contraire de la situation plus simple admise pour les halogénures f. c. c.

Nous remercions Monsieur M. Aegerter pour de fructueuses discussions et le Fonds National Suisse de la Recherche Scientifique de son appui financier.

Bibliographie

- [1] M. N. KABLER et D. A. PATTERSON, Phys. Rev. Lett. 19, 652 (1967).
- [2] H. LAMATSCH, J. ROSSEL et E. SAURER, Phys. Stat. Sol. 48, 437 (1971).
- [3] H. LAMATSCH, Thèse, Université de Neuchâtel (1971).

Etude par frottement intérieur de la relaxation de Zener dans les alliages or-cuivre¹⁾

par C. BONJOUR et W. BENOIT

(Laboratoire de Génie Atomique de l'EPF, Lausanne)

Des mesures de frottement intérieur ont été réalisées sur deux alliages différents d'or-cuivre. Dans les deux cas, un pic de relaxation de type Zener [1]–[3] a été observé (fig. 1). En reportant le logarithme de la fréquence de vibration ν de l'échantillon en fonction de l'inverse de la température du maximum du pic on obtient une droite (fig. 2) dont la pente détermine l'énergie de relaxation E_R du phénomène (tableau). A partir de ces valeurs expérimentales et en admettant le modèle du solide linéaire idéal on calcule la valeur théorique de la largeur à mi-hauteur du pic [4]

$$\Delta \left(\frac{1}{T} \right) = \frac{2,633 k}{E_R}$$

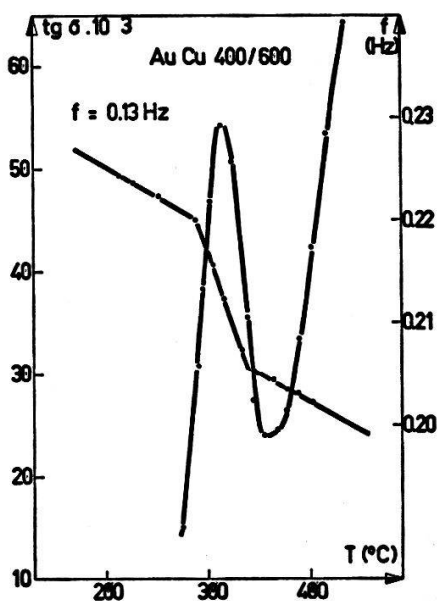


Figure 1

¹⁾ Ce travail a été partiellement subventionné par le Fonds National Suisse de la Recherche Scientifique, subside no. 2.409 70.

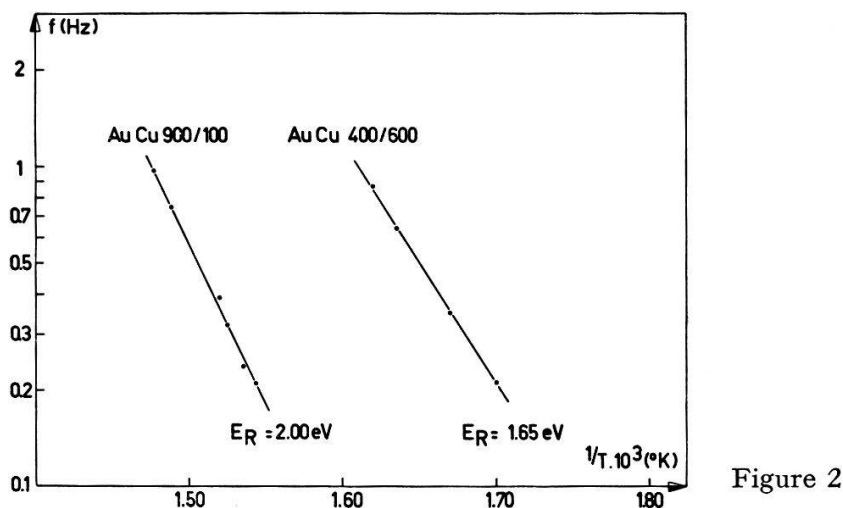


Figure 2

Tableau 1

Alliage (en poids)	E_R	α	Q_{max}^{-1}	$\Delta f/f$	γ	$\gamma(\alpha)$
900/100	2,00	1,10	$6,8 \cdot 10^{-3}$	$0,75 \cdot 10^{-2}$	0,91	0,94
400/600	1,65	1,18	$52 \cdot 10^{-3}$	$6,2 \cdot 10^{-2}$	0,84	0,86

Les pics obtenus expérimentalement sont systématiquement plus larges que les pics théoriques. Le paramètre α caractérise cet élargissement.

$$\alpha = \frac{\Delta \left(\frac{1}{T} \right)_{\text{expérimental}}}{\Delta \left(\frac{1}{T} \right)_{\text{théorique}}}.$$

Simultanément à la présence d'un pic de frottement intérieur, le module d'Young varie en fonction de la température (fig. 1).

$$Q_{max}^{-1} = \frac{1}{2} \frac{\Delta E}{E} \cong \frac{\Delta f}{f}.$$

Les valeurs expérimentales reportées dans le tableau mettent en évidence un écart à cette loi caractérisée par le facteur γ .

$$Q_{max}^{-1} = \gamma \frac{\Delta f}{f}.$$

Si l'on admet que l'élargissement des pics est dû à une répartition spectrale sur les temps de relaxation, on peut montrer, en choisissant par exemple des répartitions gaussiennes [5], que les spectres utilisés pour expliquer l'élargissement α conduisent à des valeurs de $\gamma[\gamma(\alpha)]$ proches des valeurs expérimentales (tableau).

Quelle est la raison physique de ce spectre?

Le pic Zener s'explique par la diffusion orientée des atomes [6]. On admet généralement que

$$E_R = E_D = E_M + E_F$$

où E_D = Energie de migration des atomes,
 E_M = Energie de migration des lacunes,
 E_F = Energie de formation des lacunes.

Admettons que E_F soit une constante indépendante de l'atome considéré. Paltenghi [7] a montré que E_M est une fonction simple de la température de fusion dans le cas d'un métal pur. Or, la température de fusion d'un alliage est mal définie, elle varie entre la température du liquidus et celle du solidus. On peut donc tenter de corréliser l'élargissement des pics de Zener à l'écart de température entre le liquidus et le solidus. Le diagramme de phase de l'alliage or-cuivre indique que cet écart de température est plus grand dans le cas de l'alliage 400/600 (17,4% At Au) que dans celui de l'alliage 900/100 (74,4% At Au), ce qui va bien dans le sens voulu. Des mesures effectuées sur l'alliage 800/200 (56,3% At Au) auraient dû en principe mettre en évidence un pic non élargi; les résultats obtenus ne sont pas concluants, le phénomène de Zener étant fortement perturbé par la transformation ordre-désordre qui se situe à la même température.

Références

- [1] DE MORTON et LEAK, *Metal Sci. J.* 42, 182 (1967).
- [2] C. ZENER, *Elasticité et anélasticité des métaux* (Dunod 1955).
- [3] A. S. NOWICK et D. P. SERAPHIM, *Acta Met.* 9, 40 (1961).
- [4] W. BENOIT, *Mém. Sci. Rev. Met.* 66, no. 10, 763 (1969).
- [5] A. S. NOWICK et B. S. BERRY, *IBM J. Res. Develop.* 5, 297 et 312 (1961).
- [6] A. S. NOWICK et W. R. HELLER, *Adv. Phys.* 12, 251 (1963).
- [7] J. J. PALTENGLI, *Helv. phys. Acta* 42, 54 (1969).

Etude par mesure du frottement intérieur de la recristallisation d'un argent écroui et irradié aux γ^1)

par A. ISORÉ et W. BENOIT

(Laboratoire de Génie Atomique de l'EPF, Lausanne)

Le rôle joué par les lacunes dans le phénomène de recristallisation est généralement considéré comme fondamental. Il semble qu'un joint de grains ne puisse se déplacer que s'il a absorbé une quantité suffisante de lacunes [1] et que sa diffusion doive se faire par la migration des lacunes [2]. Enfin certaines théories de germination font appel à des mécanismes qui ne peuvent exister sans l'apport de lacunes [1], [3].

¹) Ce travail a été partiellement subventionné par le Fonds National Suisse de la Recherche Scientifique, subsidence no 2.409.70.

Expérimentalement on a souvent observé que des métaux écrouis à basse température recristallisent avant des métaux écrouis à température ambiante; Mengelberg, Meixner et Lücke [4] ont été les premiers à attribuer ce phénomène aux lacunes. Plus récemment, des expériences ont montré que l'on abaisse la température de recristallisation d'un métal et que l'on accélère sa cinétique de recristallisation lorsqu'on y introduit, avant ou en cours de recristallisation, des lacunes en surconcentration, soit par écrouissage à basse température [5], soit par trempe avant écrouissage [6], soit encore par irradiation [7].

Le travail que nous présentons ici a été réalisé sur de l'argent de pureté 99,998% laminé de 7% à température ambiante, puis irradié aux γ (1,33 MeV) à -70°C . Le taux de production de paires de Frenkel par cette irradiation est d'environ $2,5 \cdot 10^{10}$ paires/cm³ s [8].

Nous avons effectué des mesures de frottement intérieur Q^{-1} et de défaut de module élastique $\Delta E/E$, dans une installation de vibration de flexion [9], à 20°C , après des recuits de 1 heure à des températures allant de 50°C à 350°C .

Résultats

Les résultats obtenus sur des échantillons écrouis puis irradiés sont donnés par les figures 1 et 2 où nous avons représenté les variations du frottement intérieur (fig. 1) et du défaut de module (fig. 2) en fonction des températures des recuits, pour deux temps d'irradiation (*a*: 45 heures et *b*: 135 heures). Des mesures de microdureté montrent que la recristallisation a lieu à température plus basse ($\sim 10^\circ\text{C}$) pour l'échantillon le plus irradié alors qu'on ne décèle pas de différence entre les températures de recristallisation de l'échantillon irradié 45 heures et d'un échantillon non irradié.

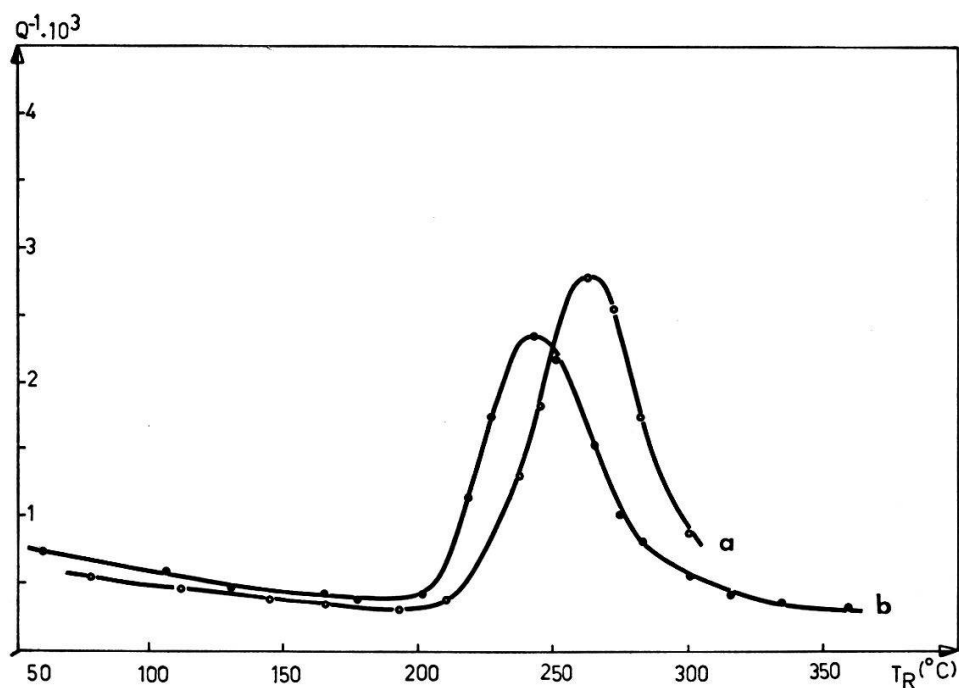


Figure 1

Variations en fonction des températures de recuits isochrones, du frottement intérieur d'échantillons d'argent laminés 7% puis irradiés aux γ pendant 45 heures (*a*), et 135 heures (*b*).

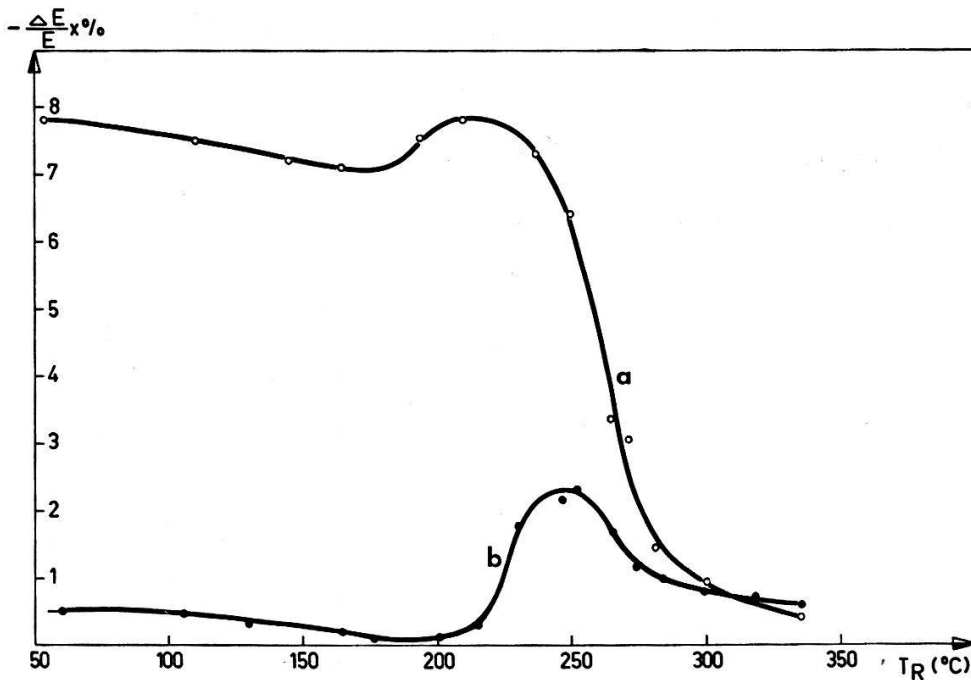


Figure 2

Variations du défaut de module d'échantillons d'argent laminés puis irradiés 45 heures (a), et 135 heures (b).

Discussion

Les variations du frottement intérieur et du défaut de module ont été discutées dans un précédent travail [10]. Les irradiations ayant été faites à -70°C , il est raisonnable de penser que les seuls défauts libres qui ont pu être introduits dans nos échantillons sont des monolacunes.

Par comparaison des courbes obtenues pour les deux taux d'irradiations nous pouvons faire les remarques suivantes:

1. Le frottement intérieur et le défaut de module atteignent leur valeur minimale après recristallisation pour des recuits à plus basse température dans le cas de l'échantillon le plus irradié. Ceci s'accorde bien avec le fait que la température de recristallisation est plus basse pour l'échantillon irradié 135 heures.

2. Le maximum de frottement intérieur de l'échantillon le plus irradié est repoussé vers les basses températures de recuit. La situation inverse se produit pour le maximum de défaut de module. Le défaut de module mesuré après un recuit à 50°C est passé de -8% (échantillon irradié 45 heures) à $-0,5\%$ (échantillon irradié 135 heures), alors que le frottement intérieur n'a pas diminué. Il est impossible d'attribuer aux défauts d'irradiation libres une telle variation du défaut de module en rapport avec le nombre de défauts créés par 135 heures d'irradiation ($\sim 5 \cdot 10^{15}/\text{cm}^3$); il faudrait plus de 1% d'interstitiels [11]. Par contre, on peut très bien interpréter ce résultat par l'épinglage des dislocations: en admettant que la densité de dislocations soit 10^{10} cm/cm^3 , il suffirait que $\sim 10^{15}$ défauts/ cm^3 viennent sur les dislocations¹⁾; ces défauts seraient des interstitiels créés lors de l'irradiation et qui peuvent migrer à -70°C .

¹⁾ Ce calcul a été effectué à partir de la relation $\Delta E/E = -0,12 A(A/N)^2$ où A est la densité de dislocations glissiles et N le nombre de points d'ancrage par unité de longueur de dislocation [10].

On doit donc admettre, si l'hypothèse de l'épinglage est juste, que le frottement intérieur mesuré après irradiation prolongée possède une composante indépendante des dislocations qui interviennent dans le défaut de module, et que cette composante cache l'effet d'épinglage.

3. La diminution du défaut de module entre 100 et 190 °C observée sur l'échantillon le plus irradié serait due à l'arrivée de $5 \cdot 10^{14}$ défauts/cm³ sur les dislocations en admettant que Δ ne varie pas. Il est probable que ces défauts sont les lacunes créées par l'irradiation. Ces lacunes permettent aux dislocations de monter et de se réarranger en quittant certains points d'ancrage (impuretés). Les dislocations sont plus libres. En même temps, une partie des lacunes doit aller dans les joints de grains, leur permettant de migrer à plus basse température. Tout ceci se traduit par une diminution de la température de recristallisation.

Références

- [1] R. W. CAHN, in: *Recrystallization, Grain Growth and Textures*, ASM, Metals Park Ohio, 99 (1966).
- [2] K. LÜCKE et H. P. STÜWE, in: *Recovery and Recrystallization of Metals*, AIME ed. L. HIMMEL (Gordon and Breach Science Publishers, Inc. (New York 1963), p. 171.
- [3] J. E. BAILEY, *Phil. Mag.* 5, 833 (1960).
- [4] H. D. MENGELBERG, M. MEIXNER et K. LÜCKE, *Acta Met.* 13, 835 (1965).
- [5] J. GOBRECHT et M. FELLER-KNIEPMEIER, *Z. Metallk.* 62, 405 (1971).
- [6] M. FELLER-KNIEPMEIER et J. GOBRECHT, *Acta Met.* 19, 569 (1971).
- [7] A. BEYER et R. SIZMANN, *Phys. Stat. Sol.* 26, 359 (1968).
- [8] D. O. THOMPSON, O. BUCK, R. S. BAMES et H. B. HUNTINGTON, *J. appl. Phys.* 38 (8), 3051 (1967).
- [9] R. C. FORNEROD, *Mem. Sci. Rev. Met.* 46 (1969).
- [10] A. ISORÉ et W. BENOIT, *Mem. Sci. Rev. Met.*, Avril (1972).
- [11] J. HILLAIRET, E. BONJOUR et J. P. POIRIER, *J. Phys.* 32 (7), C 2-31 (1971).

Magnetische Eigenschaften von Alkali-Hyperoxiden

von A. ZUMSTEG, M. BÖSCH, W. KÄNZIG

(Laboratorium für Festkörperphysik der ETH, Zürich)

und H. ROHRER

(IBM-Forschungslaboratorium, Rüschlikon)

Die Alkali-Hyperoxide (MO_2 , M: Na, K, Rb, Cs) sind Ionenkristalle, die aus den metallischen Kationen M^+ und den magnetischen molekularen Anionen O_2^- bestehen.

Es ist uns gelungen, das Ausgangsmaterial durch Rekristallisation im flüssigen Ammoniak zu reinigen und kleine Einkristalle zu züchten. Es wurden die Anfangsuszeptibilität und die Magnetisierung in gepulsten Feldern gemessen und ESR-Spektren aufgenommen.

Bei NaO_2 zeigen die Suszeptibilitätsmessungen, dass sowohl die Umwandlung bei 230 °K von der ungeordneten in die geordnete Pyritstruktur, als auch die Umwandlung bei 200 °K von der Pyrit- in die Markasitstruktur erster Ordnung sind. Die effektiven magnetischen Momente betragen 1,95 für die ungeordnete und 1,76 für die geordnete

Pyritstruktur. Die entsprechenden Curie-Weiss-Temperaturen sind -31°K und $+33^\circ\text{K}$. In der Markasitphase sinkt die Suszeptibilität mit sinkender Temperatur und fällt unterhalb 30°K steil ab.

KO_2 zeigt unterhalb und in der Gegend des Néel-Punktes (7°K) metamagnetisches Verhalten bei Feldern über 70 kGauss. Bei RbO_2 und CsO_2 weist die Temperaturabhängigkeit der Suszeptibilität auf eine antiferromagnetische Umwandlung bei $15,3^\circ\text{K}$ bzw. 28°K hin.

Influence de la pression sur la surface de Fermi de l'aluminium

par R. GRIESSEN et J. L. OLSEN

(Laboratoire de Physique du corps solide, EPF, Zurich)

Nous avons mesuré la magnétostriction et le moment magnétique de monocristaux d'aluminium dans des champs allant jusqu'à 22 kOe et des températures entre $1,1^\circ\text{K}$ et $4,2^\circ\text{K}$. La magnétostriction présente des oscillations étroitement liées à l'existence de l'effet de Haas-van Alphen. La sensibilité relative de $2 \cdot 10^{-10}$ de notre dilatomètre nous a permis d'observer ces oscillations dans des champs magnétiques peu intenses (environ 4 kOe). Pour des champs plus élevés, les variations relatives de longueur peuvent atteindre 10^{-6} . Nous avons déterminé la contribution de chaque section extrémale de la surface de Fermi à l'aide d'une analyse de Fourier appropriée et calculé l'influence de la pression sur la troisième zone de la surface de Fermi à l'aide de la relation de Condon: $\varepsilon_i = -\tau_i(\partial S/\partial\sigma_i)/(\partial S/\partial\theta)$ où S représente l'aire de la section extrémale, ε_i l'élongation relative, σ_i une tension uniaxiale, τ_i le moment de torsion et θ l'orientation du champ. Nos résultats sont en accord avec les valeurs obtenues à l'aide d'un modèle de pseudopotentiel de Harrison et Ashcroft.

Anisotropie in der Längenänderung von Gallium-Einkristallen beim Übergang zur Supraleitung

von H. R. OTT

(Laboratorium für Festkörperphysik der ETH, Zürich)

Die Längenänderung beim supraleitenden Übergang wurde an Gallium-Einkristallen in den drei Hauptachsen zwischen $0,3^\circ\text{K}$ und $1,1^\circ\text{K}$ gemessen. Für die relativen Längenänderungen findet man für die verschiedenen Kristallrichtungen bei $T = 0^\circ\text{K}$

$$\left(\frac{\Delta l}{l}\right)_a = -3 \cdot 10^{-9}, \quad \left(\frac{\Delta l}{l}\right)_b = +4,4 \cdot 10^{-9}, \quad \left(\frac{\Delta l}{l}\right)_c = +1,8 \cdot 10^{-9}.$$

Die Resultate werden kurz im Rahmen einer mikroskopischen Theorie diskutiert.

**Effet d'ordre cristallin dans le supraconducteur V_3Au :
effet électronique ou phonique?**

par A. JUNOD

(Institut de Physique de la Matière Condensée, Université de Genève)

La température de transition supraconductrice du V_3Au varie dans un rapport 1 à 300 suivant l'état d'ordre cristallin. L'origine microscopique de ce phénomène peut être électronique ou (et) phononique. Des mesures de chaleur spécifique jusqu'à 40°K montrent que le second effet est négligeable; la variation de la densité d'états électroniques suffit à justifier l'augmentation spectaculaire de la température de transition si l'on admet que le potentiel de Coulomb répulsif est élevé. D'autre part, les déviations de la chaleur spécifique du réseau par rapport à la loi de Debye sont remarquables.

Les propriétés supraconductrices et magnétiques des alliages $La_{3-x}Ce_xIn$

par H. JONES, Ø. FISCHER, G. BONGI et A. TREYVAUD

(Institut de Physique de la Matière Condensée, Université de Genève)

Nous avons mesuré le comportement anormal de la température critique, T_c , en fonction de la concentration, x , dans le système $La_{3-x}Ce_xIn$. De plus, nous avons mesuré le champ critique H_{c2} et la susceptibilité χ de cet alliage. Ces mesures sont comparées avec la théorie de Müller-Hartmann et Zittartz [1]. Les mesures de champ critique et de susceptibilité indiquent l'existence d'un ordre antiferromagnétique à courte portée des ions de cerium lorsque $x \geq 0,04$. Nous expliquons pourquoi l'effet de compensation proposé par Jaccarino et Peter [2] n'est pas observé dans le $La_{3-x}Ce_xIn$ bien qu'il existe une grande interaction d'échange négative entre les ions de Cerium et les électrons de conduction.

Bibliographie

- [1] E. MÜLLER-HARTMANN et J. ZITTARTZ, Phys. Rev. Letters 26, 428 (1971).
[2] V. JACCARINO et M. PETER, Phys. Rev. Letters 9, 290 (1962).

**Der Einfluss von Gitterinstabilitäten auf supraleitende und mechanische
Eigenschaften in TaC_x**

von H. R. ZELLER

(Brown Boveri Forschungszentrum, 5400 Baden)

TaC_x zeigt eine extrem starke Abhängigkeit in vielen seiner physikalischen Eigenschaften von der Stöchiometrie, die im Rahmen eines Bändermodells nicht verstanden werden kann. Elektron-Tunnelexperimente an TaC -Einkristallen zeigen, dass TaC in der Nähe einer Gitterinstabilität ist, was zu Gitterschwingungsanomalien und zu

einer extrem starken Abhängigkeit des Phononspektrums von der Stöchiometrie führt. Wir zeigen, dass dies für die Erklärung der supraleitenden, elektrischen und mechanischen Eigenschaften genügt und dass die elektronische Struktur praktisch unabhängig vom Kohlenstoffgehalt ist.

Chaleur spécifique, supraconductivité et ordre cristallin d'alliages de structure A 15 à base de Molybdène

par A. PAOLI et R. FLÜKIGER

(Institut de Physique de la Matière Condensée, Université de Genève)

Des mesures de chaleur spécifique à basse température effectuées sur des échantillons de structure A 15 à base de Molybdène contenant Os, Ir, Pt, Al, Si, Ge, ont montré que l'augmentation de la température de transition supraconductrice, en fonction de l'ordre cristallin, n'est pas reflétée par le coefficient γ de la chaleur spécifique électronique.

Le comportement de γ , en fonction du nombre d'électrons par atome, ne traduit pas l'existence de la pointe de densité d'états électroniques constatée à 6,5 e/a pour les alliages à base de Nb et V, mais se rapproche de celui des alliages à base de chrome. Les alliages à base de Molybdène ont la particularité de présenter des T_c élevés (12,5°K Mo₃Os) pour des γ relativement bas.

Propriétés électroniques à basse température et structure cristalline dans le système Mo-Pt

par R. FLÜKIGER, R. ROGGEN, A. PAOLI et K. YVON

(Institut de Physique de la Matière Condensée, Université de Genève)

Des mesures de supraconductivité et de chaleur spécifique effectuées dans le système Mo-Pt, confirmées par micrographies et rayons X, sont à la base d'importantes modifications dans le diagramme de phases de Ocken [1].

La plus importante concerne la limite riche en Molybdène de la phase hexagonale compacte Mo₃Pt₂, qui s'élargit vers les hautes températures, atteignant 30 ± 1% at. de Pt à 2080°C.

La température supraconductrice est maximale à cette concentration (7,6°) et décroît linéairement jusqu'à 0,7°K pour 41% at. de Pt. Dans ce travail, nous montrons qu'un maximum de T_c pour des concentrations stables à haute température est une propriété commune à un grand nombre de système hexagonaux.

Bibliographie

- [1] J. H. N. OCKEN et J. VAN VUCHT, *Less-Commun. Metals* 15, 193 (1968).

Physique Théorique (PT)

Zur Schallausbreitung in He II

VON P. F. MEIER UND H. BECK

(Institut für Theoretische Physik der Universität Zürich)

Es existieren detaillierte Messungen von Abraham et al. [1] über Geschwindigkeit und Absorption von Ultraschall in He II. Theoretisch beschreibt das quantenhydrodynamische Modell von Landau bei $T < 0,5$ K flüssiges ^4He als ein einfaches System von wechselwirkenden Phononen:

$$H = H_0 + \int d^3x [\mathbf{v} \delta \rho \mathbf{v} + g_3(u) (\delta \rho)^3]. \quad (1)$$

Die anharmonischen Terme führen zur Dämpfung von Schall und zur Verschiebung der Geschwindigkeit. Diese Effekte sollten insbesondere im hochfrequenten Bereich $\Omega \tau \gg 1$, wo die Frequenz Ω gross ist verglichen mit der reziproken Lebensdauer τ von thermischen Phononen, durch eine einfache Störungsrechnung, welche den 3-Phononenprozess berücksichtigt, berechnet werden können. Pethik und ter Haar [2] haben ein Spektrum mit normaler Dispersion, $\omega_k = c k (1 - \gamma k^2)$, vorausgesetzt und angenommen, dass das eingeprägte Ultraschallphonon mit thermischen Phononen in Wechselwirkung tritt, welche eine endliche Lebensdauer τ haben. Obwohl neben der Grüneisenkonstante u zwei weitere Parameter, γ und τ , in die Resultate eingehen, konnte nur teilweise Übereinstimmung mit dem Experiment erreicht werden. Es gab zahlreiche Verbesserungen der Theorie [3]–[5], welche aber nur entweder die Absorption oder die Geschwindigkeit betreffen. Die Theorie sollte aber Dämpfung und Shift gleichzeitig erklären können, d. h. auf derselben Stufe der Näherungen und mit denselben Parameterwerten.

In einem ersten Schritt haben wir, ausgehend von einem linearen Spektrum $\omega_k = c k$, die Selbstenergie $\Sigma(k, \Omega) = \Delta - i/2 \Gamma$, welche zur Bestimmung der Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion benötigt wird, in niedrigster Ordnung der Störungstheorie berechnet. Der zeitliche Verlauf der Schallamplitude a ist dann gegeben durch

$$\begin{aligned} a(k, t) &\propto \int d\Omega e^{-i\Omega t} G_{ret}(k, \Omega), \\ &\propto \int d\Omega e^{-i\Omega t} [\Omega^2 - \omega_k^2 - \Delta(k, \Omega) + \frac{i}{2} \Gamma(k, \Omega)]^{-1}. \end{aligned} \quad (2)$$

Üblicherweise berechnet man das Integral im Komplexen und bestimmt näherungsweise den Realteil des Pols, indem man $\Delta(k, \Omega) \approx \Delta(k, \Omega = \omega_k)$ setzt. Der explizite Ausdruck

$$\Delta(k, \Omega) = a k^2 T^4 \left(1 + b \log \left| \frac{\Omega - \omega_k}{\Omega + \omega_k} \right|^2 \right) + c k^4 T^2 \quad (3)$$

zeigt aber, dass dieses Vorgehen hier keinen Sinn hat. Eine bessere Approximation des Pols erhält man durch Lösen der Gleichung

$$x^2 = \omega_k^2 + \Delta(k, x), \quad (4)$$

woraus dann mittels $x = c_T k$ eine temperaturabhängige Schallgeschwindigkeit c_T folgt. In das Resultat geht als einziger Parameter u ein, und mit $u = 2,8$ ergeben sich in Anbetracht der Näherungen vernünftige Resultate [6]. Der Ausdruck für den Absorptionskoeffizienten enthält die Sprungfunktion $\theta(\omega_k - c_T k)$, was zu einer verschwindenden Dämpfung führt. Dieses unphysikalische Resultat für den Imaginärteil Γ ist auf die strikte Energie- und Impulserhaltung zurückzuführen. Für den Realteil Δ sind hingegen virtuelle Prozesse massgebend, die bloss den Impuls erhalten.

In einem zweiten Schritt haben wir wie in [2] eine endliche Lebensdauer τ für thermische Phononen angenommen und den Einfluss eines nichtlinearen Spektrums, $\omega_k = c k(1 - \gamma k^2)$, untersucht. In die Bestimmungsgleichung für den Realteil des Poles der retardierten Greensfunktion gehen jetzt die Parameter γ und τ ein; und die Lösung von

$$\bar{x}^2 = \omega_k^2 + a k^2 T^4 \left(1 + b \log \left[\left(\frac{\bar{x}}{c_T k} - 1 + 3 \gamma \bar{q}^2 \right)^2 + \left(\frac{1}{\Omega \tau} \right)^2 \right] \right) + c k^4 T^2, \quad (5)$$

wo \bar{q} eine mittlere thermische Wellenzahl bedeutet, bestimmt mittels $\bar{x} = c_T k$ die Schallgeschwindigkeit \bar{c}_T in zweiter Ordnung. Der Absorptionskoeffizient α ergibt sich dann zu

$$\alpha = A k T^4 [\text{arctg} 2 \Omega \tau - \text{arctg} \Omega \tau (\Delta z + 3 \gamma \bar{q}^2)], \quad (6)$$

wobei $\Delta z = \bar{c}_T - c_T/c_T$ ist.

Aus den Gleichungen (5) und (6) ist ersichtlich, dass die erwähnte selbstkonsistente Bestimmung des Realteils des Pols wesentlich ist; denn Δz stellt einen anharmonischen Effekt dar und darf gegenüber $\gamma \bar{q}^2$ und $(\Omega \tau)^{-1}$ nicht vernachlässigt werden. Insbesondere ist es möglich, dass der zweite arctg-Term in (6) auch mit $\gamma = 0$ einen positiven Beitrag zur Dämpfung liefert, da die Lösung von (5) negative Werte für Δz ergibt. Es ist deshalb nicht direkt möglich, aus der gemessenen Absorption Aufschluss über das Vorzeichen von γ zu gewinnen [7], da ausserdem die Anharmonizitäten selbst auch eine Dispersion liefern, die temperaturabhängig ist und möglicherweise mit der hier für $T = 0$ angenommenen vergleichbar wird. Eine direkte theoretische oder experimentelle Information über die Dispersion als Funktion der Temperatur ist deshalb wünschenswert.

Literatur

- [1] B. M. ABRAHAM et al., Phys. Rev. 181, 347 (1969).
- [2] C. J. PETHIK und D. TER HAAR, Physica 32, 1905 (1966).
- [3] R. K. WEHNER und R. KLEIN, Phys. Rev. Lett. 23, 1372 (1969).
- [4] C. P. ENZ, J. Low Temp. Phys. 3, 1 (1970).
- [5] J. JAECKLE, Z. Phys. 231, 362 (1970).
- [6] P. F. MEIER und H. BECK, Phys. Lett. 36 A, 397 (1971).
- [7] H. J. MARIS und W. E. MASSEY, Phys. Rev. Lett. 25, 220 (1970).

Emission und Absorption von Phononen durch Rotonen in superfluidem Helium

von J. JÄCKLE

(Département de Physique Théorique, Université de Genève)

und K. W. KEHR

(Laboratory of Atomic and Solid State Physics, Cornell University)

Neutronenstreuexperimente mit superfluidem Helium zeigen, dass die Gruppengeschwindigkeit der Rotonen oberhalb einer bestimmten Impulsschwelle gleich der Schallgeschwindigkeit ist. Wir berechnen die sich aus der Emission und Absorption von Phononen durch «schnelle Rotonen» ergebenden Linienbreiten für tiefe Temperaturen und diskutieren die Frage, wie die Parallelität von Rotonen- und Phononenspektrum zu erklären sei.

Dispersion des phonons à grande longueur d'onde dans l'He IIpar M. DROZ¹⁾

(Département de Physique Théorique, Université de Genève)

Il ressort des expériences récentes de diffusion neutronique, d'atténuation ultrasonore et de mesure de la chaleur spécifique que la dispersion est probablement anormale pour les grandes longueurs d'ondes. Nous considérons le cas d'un gaz de Bose dilué caractérisé par un paramètre d'interaction ξ et de dilution β . En considérant les self énergies d'ordre zéro en β mais à tous les ordres en ξ , nous voyons que le résultat de Bogoliubov pour la dispersion est exact à l'ordre β^2 près. Les diagrammes d'ordre un en β conduisent à des termes non analytiques pour l'énergie $\omega(k)$.

Particules galiléennes et principe de correspondance

par C. PIRON

(Département de Physique Théorique, Université de Genève)

Nous proposons de définir une particule comme un système pour lequel on peut définir les observables: position, temps, quantité de mouvement. Nous en donnons ensuite les modèles classiques et quantiques. Pour chacun de ces modèles nous déterminons l'Hamiltonien le plus général satisfaisant l'invariance galiléenne. Par comparaison des résultats classiques et quantiques, nous justifions le principe de correspondance. Chemin faisant, nous démontrons que le couplage spin-orbite n'est pas incompatible avec l'invariance galiléenne.

¹⁾ Subventionné par le Fonds National Suisse.

Groupe conforme pour des espace-temps à 4 et à 5 dimensions

par P. B. SCHEURER¹⁾

(Département de Physique Théorique, Université de Genève)

L'argument de H. Weyl sur les transformations conformes et celui sur l'égalité dans le vide de la 2-forme électromagnétique et de sa duale montrent qu'un espace-temps à 4 dimensions convient au photon. Pour décrire les particules à masse propre non nulle, on peut introduire le temps propre τ comme 4^e dimension spatiale, et étudier le groupe conforme pour la métrique $dx^2 + dy^2 + dz^2 + c^2 d\tau^2 - c^2 dt^2 = 0$. A t constant, τ se comporte comme un temps imaginaire, et l'équation de Schrödinger se transforme en équation de conduction de la chaleur, en accord avec l'interprétation que l'entropie est donnée par $S = -i x^\mu p_\mu$. La charge électrique apparaît comme orientation de l'espace-temps par rapport au temps propre.

Equivalence de l'action et de l'entropie II. Bicaractéristiques

par P. B. SCHEURER²⁾

(Département de Physique Théorique, Université de Genève)

On rappelle qu'on donne la même dimension physique à l'action, en rapport avec le plan tangent, et à l'entropie, en rapport avec le plan cotangent. L'équation de Newton-Einstein $dx^i/p^i = dt/m$, $i \in \{1, 2, 3\}$, et sa duale sont obtenues comme bicaractéristiques de l'équation aux dérivées partielles du 1^{er} ordre $F(\mathbf{q}, z(\mathbf{q}), \partial z/\partial \mathbf{q}) = 0$, avec la fonction $z(\mathbf{q})$ égale à l'action $A(\mathbf{x})$ ou à l'entropie $S(\mathbf{p})$ suivant le cas.

Flow Alignment of Nematic Liquid Crystals

by W. HELFRICH

(F. Hoffmann-La Roche & Co. Ltd., Basel, Switzerland)

Nematic Liquid Crystals subject to shear flow align nearly parallel to the direction of flow, the flow alignment angle being typically 10° . An explanation has been given before which emphasizes that nematic flow alignment represents a stationary state rather than a rotation of variable speed as in the case of macromolecules. We wish to present a complementary model in which the restraint of molecular rotation is lifted. It seems to improve the agreement of theory with experiment.

¹⁾ Subventionné par le Fonds National Suisse.

²⁾ Subventionné par le Fonds National Suisse.

On the Specific Heat Density of Ising Spin Systems

by PH. CHOQUARD

(Laboratoire de Physique Théorique, EPFL, 13, avenue Mon Loisir, 1006 Lausanne)

Let

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{r \neq s} V_{rs} S_r S_s,$$

be the Hamiltonian of a system of N Ising spins ($S_r = \pm 1$) interacting ferromagnetically in a simple cubic lattice of volume $\Lambda = N a^3$. In standard notation, the specific heat C_A reads:

$$C_A = k_B \frac{1}{4} \sum_{r,s,t,u} \beta V_{rs} \beta V_{tu} (\langle S_r S_s S_t S_u \rangle - \langle S_r S_s \rangle \langle S_t S_u \rangle). \quad (1)$$

Let

$$G_{rs} \equiv \langle S_r S_s \rangle,$$

$$G_{rstu} \equiv \langle S_r S_s S_t S_u \rangle,$$

be the two and four spin correlation functions. Let further \bar{G}_{rstu} be the reduced four correlation function i.e.:

$$\bar{G}_{rstu} \equiv G_{rstu} - G_{rs} G_{tu} - G_{rt} G_{su} - G_{ru} G_{st}.$$

We now remark that, if $t = u = v$, then, since $S_r^2 = 1$

$$\bar{G}_{rsvv} = -2 G_{rv} G_{sv} \quad \forall r, s, v. \quad (2)$$

It is this set of relations which will play a central role in what follows. We observe in particular that in the R.P.A., \bar{G}_{rstu} would be zero by definition, thus \bar{G}_{rsvv} as well, in contradiction with equation (2) which is true irrespective of the temperature. For convenience, define:

$$\Gamma_{rstu} \equiv -\frac{1}{2} \bar{G}_{rstu}.$$

We introduce next the specific heat density per spin. For this purpose let $\delta = s - r$, $\delta' = u - t$, $\mathbf{R} = 1/2(\mathbf{u} + \mathbf{t}) - 1/2(\mathbf{r} + \mathbf{s})$. The system being translationally invariant, we have

$$G_{xx'} = G(|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|), \quad G_{rstu} = G(\mathbf{R}, \delta, \delta'), \quad \Gamma_{rstu} = \Gamma(\mathbf{R}, \delta, \delta')$$

depending upon $|\mathbf{R}|$, $|\delta|$, $|\delta'|$ and the angles ϑ , ϑ' that δ and δ' make with \mathbf{R} . Thus equation (1) becomes:

$$\begin{aligned} C_A &= N k_B \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{R}, \delta, \delta'} \beta V_\delta \beta V_{\delta'} \\ &\quad \times \left\{ G\left(\left|\mathbf{R} + \frac{\delta' + \delta}{2}\right|\right) G\left(\left|\mathbf{R} - \frac{\delta' + \delta}{2}\right|\right) \right. \\ &\quad \left. + G\left(\left|\mathbf{R} + \frac{\delta' - \delta}{2}\right|\right) G\left(\left|\mathbf{R} - \frac{\delta' - \delta}{2}\right|\right) - 2 \Gamma(\mathbf{R}, \delta, \delta') \right\} \\ &\equiv N k_B \sum_{\mathbf{R}} C(\mathbf{R}). \end{aligned}$$

At this point, we make use of equation (2) in noticing that:

$$2 G \left(\left| \mathbf{R} + \frac{\boldsymbol{\delta} \pm \boldsymbol{\delta}'}{2} \right| \right) G \left(\left| \mathbf{R} - \frac{\boldsymbol{\delta} \pm \boldsymbol{\delta}'}{2} \right| \right) = \Gamma(\mathbf{R}, \boldsymbol{\delta} \pm \boldsymbol{\delta}', 0) \quad (3)$$

and, since $V_{-\boldsymbol{\delta}} = V_{\boldsymbol{\delta}}$ we obtain finally:

$$\begin{aligned} C(\mathbf{R}) &\equiv \frac{1}{4} \sum_{\boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\delta}'} \beta V_{\boldsymbol{\delta}} \beta V_{\boldsymbol{\delta}'} (G(\mathbf{R}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\delta}') - G(\boldsymbol{\delta}) G(\boldsymbol{\delta}')) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\delta}'} \beta V_{\boldsymbol{\delta}} \beta V_{\boldsymbol{\delta}'} (\Gamma(\mathbf{R}, \boldsymbol{\delta} + \boldsymbol{\delta}', 0) - \Gamma(\mathbf{R}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\delta}')) \\ &\equiv \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\delta}'} \beta V_{\boldsymbol{\delta}} \beta V_{\boldsymbol{\delta}'} F(\mathbf{R}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\delta}') . \end{aligned} \quad (4)$$

Inspection of equation (4) clearly indicates that:

$$F(\mathbf{R}, \boldsymbol{\delta}, 0) = F(\mathbf{R}, 0, \boldsymbol{\delta}') = F(\mathbf{R}, 0, 0) = 0 . \quad (5)$$

From the last term of equation (5) in particular follows that the asymptotic behaviour of $C(\vec{R})$ does *not* begin with a term proportional to $G(R)^2 = \Gamma(R, 0, 0)$ and this, for all temperatures. The breakdown of the R.P.A. prediction, generally accepted to be valid at high temperature, has first been demonstrated for the 3-dimensional Ising model by Camp and Fisher [1] who found that at high temperature $\vec{C}(R)$ behaves as $(1/R) G(R)^2$ for large $R = |\mathbf{R}|$. In order to reproduce and generalize this result, the two other terms of equation (5) are needed, together with an appropriate perturbation calculus. This is the object of the next paper. Here another generalization is noteworthy.

The property that the asymptotic expansion of $C(\vec{R})$ does not begin with a term $\propto G(R)^2$ not only characterize Ising spin 1/2 systems at all temperatures but also applies to the larger class of classical and quantum spin systems which are such that the square of the spin operator be a multiple of the identity and that their interactions be isotropic and of finite range. The proof follows the pattern indicated above.

Let us proceed in taking the Fourier transform of the relevant correlation functions. With

$$G(\vec{x}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} G(\mathbf{p}) ,$$

$$\Gamma(\mathbf{R}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\delta}') = \frac{1}{N^3} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R} + i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta} + i\mathbf{k}'\cdot\boldsymbol{\delta}'} \Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}') ,$$

$$C(\mathbf{R}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} C(\mathbf{q}) ,$$

then equations (2) and (3) become the following set of sum rules:

$$G \left(\frac{\mathbf{q}}{2} + \mathbf{k} \right) G \left(\frac{\mathbf{q}}{2} - \mathbf{k} \right) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad \forall \mathbf{q}, \mathbf{k} \quad (6)$$

and $C(\vec{q})$ reads:

$$C(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \beta^2 \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} (V(\mathbf{k})^2 - V(\mathbf{k}) V(\mathbf{k}')) \Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'). \quad (7)$$

When dealing with applications it is often convenient to exploit the cancellation theorem in re-writing the form factor

$$\begin{aligned} V(\mathbf{k})^2 - V(\mathbf{k}) V(\mathbf{k}') &\rightarrow (V(\mathbf{k}) - V(0))^2 - (V(\mathbf{k}) - V(0)) (V(\mathbf{k}') - V(0)) \\ &= \sum_{\boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\delta}'} V_{\boldsymbol{\delta}} V_{\boldsymbol{\delta}'}, ((e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\delta}} - 1) (e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\delta}'} - 1) - (e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\delta}} - 1) (e^{i\mathbf{k}'\boldsymbol{\delta}'} - 1)), \end{aligned}$$

then $C(\vec{q})$ and $C(\vec{R})$ become:

$$\begin{aligned} C(\mathbf{q}) &= \frac{1}{2} \beta^2 \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \\ &\times ((V(\mathbf{k}) - V(0))^2 - (V(\mathbf{k}) - V(0)) (V(\mathbf{k}') - V(0))) \Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}'), \quad (8) \end{aligned}$$

$$C(\mathbf{R}) = \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\delta}'} \beta V_{\boldsymbol{\delta}} \beta V_{\boldsymbol{\delta}'} (F(\mathbf{R}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\delta}') - F(\mathbf{R}, \boldsymbol{\delta}, 0) - F(\mathbf{R}, 0, \boldsymbol{\delta}') + F(\mathbf{R}, 0, 0)). \quad (9)$$

Now it is clear that equations (4) and (9) or (7) and (8) are equivalent. The point is that the perturbation calculus of $\Gamma(\mathbf{q}, \mathbf{k}, \mathbf{k}')$ or $F(\mathbf{R}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\delta}')$ in the two versions is different. In the first version, the approximate Γ and F must be sum rule conserving and can in fact be made so in respecting equations (3) or (6) whereas in the second version, the approximate Γ and F need not be, the sum rule having been explicitly implemented. In practice the two versions serve to test one another. In the next paper, we apply the second version which more straightforward than the first one.

References

- [1] W. J. CAMP and M. FISHER, Phys. Rev. Lett. 26, 73-77 (1971).

Asymptotic Behaviour of the Specific Heat Density of 3-Dimensional Ferromagnetic Ising Spin System for $T \gg T_c$

by PH. CHOQUARD and A. HINTERMANN

(Laboratoire de Physique Théorique, EPFL, 13, avenue Mon Loisir, 1006 Lausanne)

Let

$$Z(\beta V, h) \equiv \sum_{\{S_r = \pm 1\}} \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{r,s} \beta V_{rs} S_r S_s + \sum_r h_r S_r \right]$$

be the partition function of a system of Ising spins subject to ferromagnetic short range interactions. Introducing the operator:

$$\Omega = \frac{1}{2} \sum_{r,s} V_{rs} \frac{\partial^2}{\partial h_r \partial h_s},$$

the partition function writes:

$$Z(\beta V, h) = e^{\beta\Omega} \sum_{\{S_r = \pm 1\}} e^{\sum_r h_r S_r} = e^{\beta\Omega} Z(0, h) \quad (1)$$

this formula, called Hori formula, indicates that $Z(\beta V, h)$ can be obtained as the solution of the diffusion equation

$$\frac{\partial Z}{\partial \beta} = \Omega Z, \quad (2)$$

with the initial condition:

$$Z(0, h) = \prod_r 2 Ch h_r.$$

For the solution of equation (2) to be meaningful, Ω must be a positive definite operator. If real auxiliary fields h_r only are considered this implies that $V_{rr'}$ be a positive definite matrix, which is not the case for the Ising model. Choosing for the Fourier transform of $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ the model form:

$$V_{Model}(\mathbf{k}) = V(0) \left(1 + \frac{k^2}{\alpha^2}\right)^{-1},$$

with

$$\alpha^{-2} = \frac{1}{6} \sum_{\delta} \frac{\delta^2 V_{\delta}}{\sum_{\delta} V_{\delta}},$$

Ω has the required property and since $V_{Model}(k)$ coincides with V_{Ising} up to order k^2 we are able to study the results of Camp and Fisher since the latter are exact to order k^2 in $V(k)$ and for $T \gg T_c$. In the following, we shall also consider the high temperature limit.

Defining the inverse matrix

$$A_{rr'} = \left(\frac{1}{\beta V}\right)_{rr'},$$

the solution of the diffusion equation reads:

$$\begin{aligned} Z(\beta V, h) &= \frac{1}{\sqrt{\|2\pi\beta V\|}} \int_{-\infty}^{+\infty} d^N \phi \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{rr'} \phi_r A_{rr'} \phi_{r'} + \sum_r \ln 2 Ch(h_r + \phi_r) \right] \\ &\equiv \text{Tr} \varrho_0 \exp \left[\sum_r \ln 2 Ch(h_r + \phi_r) \right]. \end{aligned}$$

Here, ϕ_r is the internal field variable, conjugated to the magnetisation. The n -spin correlation function in zero field writes:

$$\langle s_1 s_2 \dots s_n \rangle = \left. \frac{\partial^n \ln Z}{\partial h_1 \dots \partial h_n} \right|_{\{h_r\}=0} = \langle \text{Th} \phi_1 \dots \text{Th} \phi_n \rangle. \quad (3)$$

Alternatively the n -spin correlation functions can be generated from derivatives of $\varrho_0(\{\phi_r\})$, after changing the integration variables ϕ_r into $\phi'_r = \phi_r + h_r$, thus producing $\varrho_0(\{\phi'_r - h_r\})$. Since the domain of integration is invariant under this transformation, the two formulations are equivalent and, in fact, produce useful identities for the development of the theory [1]. Whereas the bare perturbation calculus of n -spin correlation functions is made in terms of:

$$D_{rs}^0 = \text{Tr} \varrho_0 \phi_r \phi_s = \langle \phi_r \phi_s \rangle_0 = \beta V_{rs} .$$

the renormalized perturbation calculus is carried out in terms of the 2-field correlation function:

$$D_{rs} = \langle \phi_r \phi_s \rangle$$

which satisfies a Dyson equation:

$$D = \beta V + \beta V \pi [D] D .$$

For the high temperature limit needed below, it will suffice to take $\pi = 1$. This is the R.P.A. in which $D(\mathbf{R}) = G(\mathbf{R})$ for $\mathbf{R} \neq 0$.

Using equation (3) we now proceed to calculating the correlation function $F(\mathbf{R}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\delta}')$ [equation (4) of the preceding paper] in lowest order of perturbation. We find:

$$\begin{aligned} 2 F(\mathbf{R}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\delta}') &= D_{ru} D_{st} + D_{rt} D_{su} \\ &\quad - 2 (D_{rs} D_{rt} D_{ru} + D_{sr} D_{st} D_{su} + D_{tu} D_{tr} D_{ts} + D_{ur} D_{ut} D_{us}) \\ &\equiv 2 (F_p(\mathbf{R}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\delta}') + F_v(\mathbf{R}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\delta}') , \end{aligned}$$

where F_v (containing 3 D 's) and F_p (containing 2 D 's) are respectively the lowest order vertex and propagator contributions to F . We are left with the evaluation of the asymptotic behaviour of $C(\mathbf{R})$ [equation (9) in the preceding paper] where the differences $F(\mathbf{R}, \boldsymbol{\delta}, \boldsymbol{\delta}') - F(\mathbf{R}, \boldsymbol{\delta}, 0) - F(\mathbf{R}, 0, \boldsymbol{\delta}) + F(\mathbf{R}, 0, 0)$ come into play. With

$$D(R) = \frac{\beta V(0) \alpha^2}{4 \pi R} e^{-\kappa R}, \quad \kappa^2 = \alpha^2(1 - \beta V(0)) ,$$

we obtain for the vertex contribution to the specific heat density the following asymptotic formula:

$$C_v(\mathbf{R}) = \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\delta}'} (\beta V_{\boldsymbol{\delta}})^2 \beta V_{\boldsymbol{\delta}'}, \delta'^2 \sin^2 \vartheta' \text{Ch}(\kappa \delta \cos \vartheta) \frac{\kappa}{R} D(R)^2 \left(1 + O\left(\frac{1}{R}\right)\right) . \quad (4)$$

For the propagator contribution, we find:

$$C_p(\mathbf{R}) = (\beta V(0))^2 \frac{\kappa^2}{\alpha^4 R^2} D(R)^2 \left(1 + O\left(\frac{1}{R}\right)\right) . \quad (5)$$

Equations (4) and (5) confirm that Camp and Fisher's results derive from the lowest order sum rule conserving vertex contributions to $C(\mathbf{R})$. Equation (4) yields in

addition a precise amplitude and a directional dependance of $C(\mathbf{R})$ conveyed by the factor $Ch(\kappa \delta \cos \vartheta)$. Equation (5) indicates that:

$$\frac{C_p(\mathbf{R})}{C_{p,RPA}(\mathbf{R})} = \frac{2 \kappa^2}{\alpha^4 R^2}$$

and that

$$\frac{C_p(\mathbf{R})}{C_v(\mathbf{R})} \propto \frac{k_B T}{V(0)} \frac{\kappa}{R}$$

References

- [1] PH. CHOQUARD, Seminar Lecture in Statistical Physics, University of Illinois, March 1971.

Gitterdynamik anharmonischer Kristalle unter Einschluss singulärer Wechselwirkungen

von H. BECK und P. F. MEIER

(Institut für Theoretische Physik, Universität Zürich)

Ausgehend vom Hamiltonian für ein Gitter mit Zweikörperkräften werden mit Hilfe von Nichtgleichgewichts-Greensfunktionen Bewegungsgleichungen hergeleitet für das Verschiebungsfeld d und den Phononenpropagator G . Wenn die darin auftretende Nichtgleichgewichts-Paarkorrelationsfunktion nach kleinen Abweichungen vom Gleichgewicht entwickelt wird, erhält man ein geschlossenes System von zwei Gleichungen für d und G . Die darin auftretenden renormierten Kraftkonstanten werden mittels der Gleichgewichts-Paarkorrelationsfunktion, die auch für singuläre Wechselwirkungen berechnet werden kann, gebildet.

A Cluster Expansion for Lattice Systems

by S. STRÄSSLER

(Brown Boveri Research Center, Baden, Switzerland)

A special cluster series expansion has been derived for the Heisenberg ferromagnet in Ref. [1]. We discuss a generalized form of such a cluster expansion for an arbitrary lattice model. For special assumptions the new method reduces to the old one for a magnetic system. In general the method should be better as can be proved explicitly for a one-dimensional system.

References

- [1] B. STRIEB, H. B. CALLEN and G. HERWITZ, Phys. Rev. 130, 1798 (1963).

Temps de relaxation des magnons et propagation du second son

par J.-J. FORNEY et J. JÄCKLE

(Département de Physique Théorique, Université de Genève)

On calcule les temps de relaxation pour les processus normaux et Umklapp à trois et à quatre magnons dans un modèle de Heisenberg avec un terme d'interaction dipolaire magnétique, ainsi que pour la diffusion des magnons par des impuretés non magnétiques. Les résultats sont appliqués au cas de EuS à quelques degrés Kelvin et montrent l'existence d'une fenêtre de fréquences qui permettrait la propagation du second son dans le gaz des magnons.

On Adiabaticity of Sound Propagation in Dielectrics

by S. P. OHANESSIAN, CH. FAVRE¹) and A. QUATTROPANI

(Laboratoire de Physique Théorique, Ecole Polytechnique Fédérale, Lausanne, Switzerland)

The purpose of this note is to show under which conditions the sound propagation in dielectric crystals, is adiabatic. Leibfried and Ludwig [1] have shown adiabaticity, assuming that the atomic displacements can be separated into a mechanical and a thermal part. We present here an analogous calculation within the frame of the reduced density matrix, where the separation of the atomic displacements is avoided. A different approach to the problem is discussed by Maris [7] using a Boltzmann equation.

Consider a simple cubic crystal with the polarisation directions of the vibrations along the x_1 , x_2 and x_3 axes. This assumption leads to simplified notations without loss of generality.

Dividing the Hamiltonian into three part:

$$H = H_A + H_B + V_{AB}, \quad (1)$$

where A stands for the x_1 -direction (taken as the sound propagation direction), and B for the x_2 - and x_3 -directions, we have:

$$H_A = \frac{1}{2M} \sum_{\mathbf{m}} (p_{x_1}^{\mathbf{m}})^2 + \sum_{n=2}^4 \frac{1}{n!} \sum_{m_1 \dots m_n} \Phi_{x_1 \dots x_1}^{m_1 \dots m_n} q_{x_1}^{m_1} \dots q_{x_1}^{m_n}. \quad (2a)$$

H_B is the analogous of H_A for the x_2 - and x_3 -directions and

$$V_{AB} = \sum_{k=2}^4 \left(\sum_{\{\mathbf{m}_f\}} q_{x_1}^{\mathbf{m}_1} \dots q_{x_1}^{\mathbf{m}_{k-1}} \right) \times \left(\sum_{n=k}^4 \binom{k-1}{n} \sum_{\{\mathbf{m}_f\}} \sum_{\{x_\lambda\}} \Phi_{x_1 \dots x_\mu \dots x_\nu}^{m_1 \dots m_k \dots m_n} q_{x_\mu}^{m_k} \dots q_{x_\nu}^{m_n} \right), \quad (2b)$$

where $\{\mathbf{m}_f\}$, $\{\mathbf{m}_g\}$ refer to the lattice sites, and $\{x_\lambda\}$ stands for the x_2 - and x_3 -directions.

¹) Now at Division de la Science et de la Recherche, 3000 Berne 21.

This Hamiltonian describes a system A interacting with a system B through a potential V_{AB} . The mean value of any observable referring to the system A such as $q_{x_1}^m$ will be evaluated with the reduced density matrix $\rho_A = Tr_B \rho^{tot}$.

For simplicity we consider the Wangness-Bloch equation of motion for ρ_A [2], [3]. However we *do not* introduce the usual hypothesis on the interaction potential, $Tr_B \rho^{tot} V_{AB} = 0$; hence the Wangness-Bloch equation for ρ_A is modified by a new term, which turns out to be essential for adiabaticity of sound propagation.

The initial condition for the total density matrix is the following:

$$\rho^{tot}(t = 0) = \rho_A(t = 0) \otimes \rho_B^L,$$

where

$$\rho_B^L \propto \exp \left\{ - \int d^3 r \beta(\mathbf{r}) h_B(\mathbf{r}) \right\},$$

is the local equilibrium state and $h_B(\mathbf{r})$ is the energy density operator of the system B [4], [5].

To establish a wave equation for $Q_{x_1}^m = Tr_A \rho_A q_{x_1}^m$, we consider only terms linear in the $q_{x_1}^n$, and we neglect the terms $\propto (\Phi)^2$ since they are only responsible for the attenuation (see e.g. [3], [6]).

Using the modified Wangness-Bloch equation, we obtain:

$$M \ddot{Q}_{x_1}^m = - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{p}} \sum_{\mu, \nu} \Phi_{x_1 x_\mu x_\nu}^{mnp} \overline{q_{x_\mu}^n q_{x_\nu}^p} + - \sum_{\mathbf{n}} \left\{ \Phi_{x_1 x_1}^{mn} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{r}} \sum_{\mu, \nu} \Phi_{x_1 x_1 x_\mu x_\nu}^{mnp} \overline{q_{x_\mu}^p q_{x_\nu}^r} \right\} Q_{x_1}^n, \tag{3}$$

where the bath averages are defined by:

$$\overline{q_{x_\mu}^n q_{x_\nu}^p} = Tr_B \rho_B^L q_{x_\mu}^n q_{x_\nu}^p. \tag{4}$$

Equation (3) is formally equivalent to that obtained in Ref. [1] if the bath averages are replaced by averages on the 'thermal amplitudes' of the displacement field.

Therefore an analogous treatment leads to:

$$\rho \ddot{Q}_{x_1}^m = V^{-1} \sum_{i=1}^3 F_{, T, v_{x_1 x_i}} (\text{grad } \vartheta^m)_i + \sum_{i, j=1}^3 C_{x_1 x_i, x_1 x_j}^{isoth.} \partial_{x_i} \partial_{x_j} Q_{x_1}^m. \tag{5}$$

Here, ρ is the mass density, F the free energy of the crystal in the quasi-harmonic approximation, $v_{x_i x_j}$ are the strains and $\vartheta^m = T^m - T^0$ where T^m is the local temperature and T^0 the mean temperature of the bath.

To establish (5), we admit that the Grüneisen parameter $\gamma_{\mathbf{k}}$ is a slowly varying function in \mathbf{k} , compared to the energy per mode $\varepsilon(\mathbf{k}, T)$ [8]. With this assumption, we further find that derivatives of thermodynamic functions at constant entropy S are equal to derivatives at constant occupation numbers $n_{\mathbf{k}}$.

We now connect the temperature variation ϑ to the displacement field as in [1]:

$$v^m = - \sum_j \frac{F_{,T,v_{x_1x_j}} \partial_{x_j} Q_{x_1}^m}{F_{,T,T}}, \quad (6)$$

substituting (6) into (5) we obtain:

$$\varrho \ddot{Q}_{x_1}^m = \sum_{i,j} C_{x_1x_i, x_1x_j}^{adiab.} \partial_{x_i} \partial_{x_j} Q_{x_1}^m, \quad (7)$$

with

$$C_{x_1x_i, x_1x_j}^{adiab.} = V^{-1} \left(\frac{F_{,v_{x_1x_i}, v_{x_1x_j}} - F_{,T,v_{x_1x_i}} F_{,T,v_{x_1x_j}}}{F_{,T,T}} \right). \quad (8)$$

Equation (7) is an adiabatic wave equation for sound. The same type of equation was also found by Leibfried and Ludwig for the 'mechanical part' of the displacement field.

A more detailed paper discussing also the attenuation will be presented later.

We are indebted to Prof. Ph. Choquard for constructive criticism concerning the modification of the Wangness-Bloch equation.

References

- [1] G. LEIBFRIED and G. LUDWIG, *Solid State Physics*, eds. F. SEITZ and W. TURNBULL (Academic Press, New York and London 1963), Vol. 12, p. 275.
- [2] R. K. WANGNESS and F. BLOCH, *Phys. Rev.* 89, 728 (1956).
- [3] U. FANO, *Rev. mod. Phys.* 23, 91 (1957).
- [4] D. N. ZUBAREV, *Doklady (USSR)* 162, 532 (1965); *Soviet Phys., Doklady* 10, 452 (1965).
- [5] C. P. ENZ, *Ann. Phys. (N.Y.)* 46, 114 (1968)
- [6] C. FAVRE and P. A. MARTIN, *Helv. phys. Acta* 41, 333 (1968).
- [7] H. J. MARIS, *Phil. Mag.* 9, 901 (1964).
- [8] R. K. WEHNER and R. KLEIN, *Physica* 52, 92 (1971); W. GOETZE and K. H. MICHEL, *Z. Phys.* 223, 199 (1971).

Physique nucléaire et corpusculaire (PNC)

Spectromètre γ utilisant un cristal incurvé comme sélecteur de bandes d'énergie

par D. GEINOZ et J. KERN

(Institut de Physique de l'Université, 1700 Fribourg)

La courbe de transmission en fonction de l'énergie d'un spectromètre à cristal incurvé du type DuMond dans lequel le détecteur se trouve à l'intérieur du cercle de focalisation présente une forme trapézoïdale. Cette propriété permet de mesurer les rayons γ provenant, par exemple, d'une réaction (n, γ) , au moyen d'un détecteur

Ge(Li), par bandes d'énergie. L'atténuation du fond Compton dû aux raies de hautes énergies apporte une amélioration sensible du rapport pic sur fond dans la bande considérée. Les résultats obtenus lors de la mesure de la réaction $^{176}\text{Lu}(n, \gamma)^{177}\text{Lu}$ ont permis la mise en évidence de nouvelles transitions.

Hochauflösendes Kristallspektrometer für mesonische Röntgenstrahlen und kernphysikalische Messungen

VON O. PILLER, J. KERN UND W. BEER

(Physikinstitut der Universität 1700 Fribourg)

Für Experimente mit mesonischen Röntgenstrahlen und für kernphysikalische Messungen wurde ein hochauflösendes, fokussierendes Kristallspektrometer (Typ DuMond) gebaut.

Das Spektrometer erlaubt eine vollautomatische Messung in einem Winkelbereich von $\pm 20^\circ$. Dies entspricht, bei Wahl des geeigneten Beugungskristalls (Si, Quarz, Ge), einem Energiebereich von einigen MeV bis hinunter auf etwa 30 keV. Es können bis zu 5 Reflexordnungen gleichzeitig registriert werden. Die Messdaten werden auf Lochstreifen und Schreibmaschine ausgegeben.

Die Messgenauigkeit ist über dem ganzen Winkelbereich besser als $\pm 0,3''$. Dies entspricht einer Energiegenauigkeit von:

$$\Delta E_{[\text{eV}]} = 2,3 \cdot 10^{-4} \times \left| \frac{d}{n} \right| \times E^2_{[\text{keV}]}, \quad \begin{array}{l} d = \text{Gitterkonst. in } \text{Å} \\ n = \text{Reflexordnung.} \end{array}$$

Die Reproduzierbarkeit des Kristalldrehwinkels ist besser als $0,1''$. Die Energieauflösung errechnet sich zu:

$$\Delta E_{[\text{eV}]} = 7,8 \cdot 10^{-4} \times \left| \frac{d \cdot \Delta\theta}{n} \right| \times E^2_{[\text{keV}]}, \quad \Delta\theta = \text{Kristall-Mosaikwinkelbreite.}$$

Analyse de la diffusion $n-d$ à basse énergie

par R. VIENNET

(Institut de Physique, Université de Neuchâtel)

La diffusion élastique $n-d$ au dessous du seuil de fracture du deuton a été analysée à l'aide de l'approximation de portée effective. On a admis la conservation du moment orbital ainsi que celle du spin de voie et on a de plus supposé la matrice S dégénérée relativement au moment cinétique total. Les états S , P et D seuls ont été pris en considération. Aucune confirmation du pôle de Van Oers-Seagrave [1] dans la fonction de portée effective de l'état 2S n'a été obtenue.

Bibliographie

- [1] W. T. H. VAN OERS et J. D. SEAGRAVE, Phys. Lett. 24 B, 562 (1967).

Précision actuellement obtenue avec les détecteurs solides visuels

par B. RÜEGGER

(Eidg. Institut für Reaktorforschung, Würenlingen)

Les particules chargées, et spécialement les fragments de fissions, peuvent être détectées par les traces qu'elles laissent dans une feuille de plastique. Ces traces sont rendues visibles au microscope optique par attaque dans une solution de KOH. Le problème du comptage automatique de ces traces est actuellement résolu. Il se fait au moyen d'un analyseur électronique d'image Quantimet 720. Les performances du détecteur peuvent être exprimées par les densités extrêmes mesurables avec une précision donnée. Il est actuellement possible de mesurer automatiquement et avec une précision de $\leq \pm 1\%$ des densités de traces comprises entre 100 et 4000 traces/mm². On décrit aussi les recherches entreprises pour augmenter ce domaine de mesure.

Neutronen-Einfangquerschnitte von V, Mn, Cs, Dy und Lu im Energiebereich von 0,01 eV bis 100 eV

von F. WIDDER

(Eidg. Institut für Reaktorforschung, Würenlingen)

Mit Hilfe des Flugzeitspektrometers am DIORIT-Reaktor und eines Moxon-Rae-Detektors [1] wurden die Neutronen-Einfangquerschnitte von Vanadium, Mangan (0,01 bis 100 eV), Caesium (0,01 bis 50 eV), Dysprosium und Lutetium (0,01 bis 10 eV) gemessen. Das Ziel der Messungen war die Erfüllung verschiedener vom EANDC veröffentlichten «Requests» [2], [3].

Das Flugzeitspektrometer besteht im wesentlichen aus einem mechanischen Chopper, einem sogenannten «fast chopper», dessen Drehzahlbereich von 1500 bis 24 000 U/min reicht, einer evakuierten Flugstrecke von 15 m Länge, einem Moxon-Rae-Detektor und einem 256-Kanal-Impulshöhenanalysator. Das mit dieser Apparatur erreichbare Auflösungsvermögen beträgt 0,1 μ sec/m. Damit lassen sich im genannten Energiebereich auftretende Resonanzen hinreichend auflösen.

Die ausgewerteten Messresultate werden in Form von Kurven $\sigma_{n,\gamma}(E_n)$ dargestellt und mit den totalen Wirkungsquerschnitten verglichen. Bei der Auswertung der Messungen erwiesen sich als besonders problematisch die Korrekturen betreffend Targetaktivierung während der Messung, γ -Selbstabsorption der Targets, Mehrfachstreuung der Neutronen innerhalb der Targets und Ansprechwahrscheinlichkeit des Moxon-Rae-Detektors für Isotopengemische. Zur genauen Bestimmung bzw. Berechnung dieser Korrekturen mussten neue experimentelle und Rechen-Methoden entwickelt werden.

Eine ausführliche Arbeit erscheint demnächst als EIR-Bericht.

Literatur

- [1] F. WIDDER, *Helv. phys. Acta* 42, 560 (1969).
- [2] RENDA, EANDC-78 «AL», Dezember 1968.
- [3] RENDA, EANDC-85 «U», April 1970.

Magnetic Hyperfine Splittings of the $2 s_{1/2} - 2 p_{1/2}$ Transition in Muonic ^{115}In by R. LINK¹⁾, H. BACKE¹⁾, R. ENGFER²⁾, L. FLURI²⁾, R. MICHAELSEN³⁾, C. PETITJEAN²⁾,
H. SCHNEUWLY^{†4)} and H. K. WALTER²⁾

To be published in 'Physics Letters'.

Comparison of Muonic and Mössbauer Isomer Shiftsby H. K. WALTER⁵⁾, H. BACKE⁶⁾, R. ENGFER⁵⁾, E. KANKELEIT⁶⁾, C. PETITJEAN⁵⁾,
H. SCHNEUWLY⁷⁾ and W. U. SCHRÖDER⁶⁾

Muonic isomer shifts for 30 γ transitions in nuclei in the region $152 < A < 209$ have been measured during the last years. The results are published elsewhere [1]–[3]. Four new values of isomer shifts in ^{153}Eu are quoted in Table 1. The table entries are the same as in Ref. [2]. The data were not corrected for nuclear polarization.

To compare the muonic with the Mössbauer isomer shifts, the almost model independent moment of the charge distribution $R_K = [(K + 3)/3 \langle r^K \rangle]^{1/K}$ is used [4] with $K \mu \approx 1.17$ for the muonic ls-state in Eu and $K e \approx 2$ for the Mössbauer data.

Table 1

Evaluation of four isomer shifts in ^{153}Eu . The table entries are explained in Ref. [2].

E_γ (keV)	193.0	109.7	151.6	97.4	83.4
$I\pi \rightarrow I'\pi'$	$9/2^+ \rightarrow 5/2^+$	$9/2^+ \rightarrow 7/2^+$	$7/2^- \rightarrow 5/2^+$	$5/2^- \rightarrow 5/2^+$	$7/2^+ \rightarrow 5/2^+$
ΔE_{exp} (eV)	-183 ± 40	$+254 \pm 50$	-5680 ± 60	-5198 ± 40	
μ (n. m.)	$(2.1) \rightarrow 1.53$	$(2.1) \rightarrow 1.8$	$(3.1) \rightarrow 1.53$	$3.21 \rightarrow 1.53$	
ΔE_m (eV)	$1580 \rightarrow 1230$	$1580 \rightarrow 1380$	$2390 \rightarrow 1230$	$2590 \rightarrow 1230$	
$T_{1/2}(\text{I})$ (psec)	210	210	(50)	180	
$T_{1/2}(\text{Ml})$ (psec)	70	70	21	23	
$\alpha(\text{Ml}) \cdot 10^{-4}$	0.4	0.4	0.38	0.3	
$Rip_{statistical}$	1.2	1.2	1.3	1.4	
ΔE_{cor} (eV)	~ 5	~ 70	~ 530	~ 790	
ΔE_{is} (eV)	-180 ± 50	$+320 \pm 80$	-5150 ± 250	-4410 ± 260	-500 ± 90
$K \mu$	1.17		1.17	1.17	1.17
$\Delta R_{K\mu}/R_{K\mu} \cdot 10^4$	-0.56 ± 0.16		-16.1 ± 0.8	-13.8 ± 10.8	-1.6 ± 0.3
$\Delta R_2/R_2 \cdot 10^4$ Mössb.				$-19 [-31]$	$-0.5 [-0.8]$
Int./ μ -stop (%)	2.1 ± 0.3	0.9 ± 0.2	1.6 ± 0.3	2 ± 0.4	

Values in parenthesis () are estimated.

Values in brackets [] are derived from optical isotope shift Mössbauer calibration.

- 1) Visitor from Institut für Technische Kernphysik der T.H. Darmstadt, Germany.
- 2) Visitor from Schweizerisches Institut für Nuklearforschung (SIN), Zurich, Switzerland.
- 3) Visitor from Hahn-Meitner-Institut für Kernforschung, Berlin, Germany.
- 4) Visitor from Institut de Physique de l'Université Fribourg, Switzerland.
- 5) Visitor from SIN, Zurich, Switzerland.
- 6) Visitor from Institut für Technische Kernphysik, T.H. Darmstadt, Germany.
- 7) Visitor from Institut de Physique de l'Université Fribourg, Switzerland.

There exist two calibration schemas for the Mössbauer data [5], one based on optical isotope shift and the other on Hartree Fock calculations, which differ by a factor of ~ 1.6 . The following comparison with muonic data and model calculations favours the Hartree-Fock calibration: We have calculated the quantities $\Delta R_{1.17}/R_{1.17}$ and $\Delta R_2/R_2$ for the 97.4 keV state using the wave functions given by Faessler and Sheline [6] for a deformed Saxon-Woods potential and using a spherical harmonic oscillator shell model ($lh_{11/2} \rightarrow lg_{7/2}$) (Table 2). The agreement with the experiments is good, but essentially the small dependence on K for $K = 1.17 \dots 2$ together with the measured muonic value favours the Hartree-Fock calibration, which was then adopted also for the other Mössbauer data in the rare earth region.

Table 2
 $\Delta R_K/R_K$ for the 97.4 keV level in ^{135}Eu .

	harm. osc	deformed Saxon-Woods pot.	experiment
$\Delta R_{1.17}/R_{1.17} \cdot 10^4$	- 14.3	- 17.7	- 13.8 ± 0.8
$\Delta R_2/R_2 \cdot 10^4$ Mössb.	- 13.8	- 17.4	- 19 [- 31]

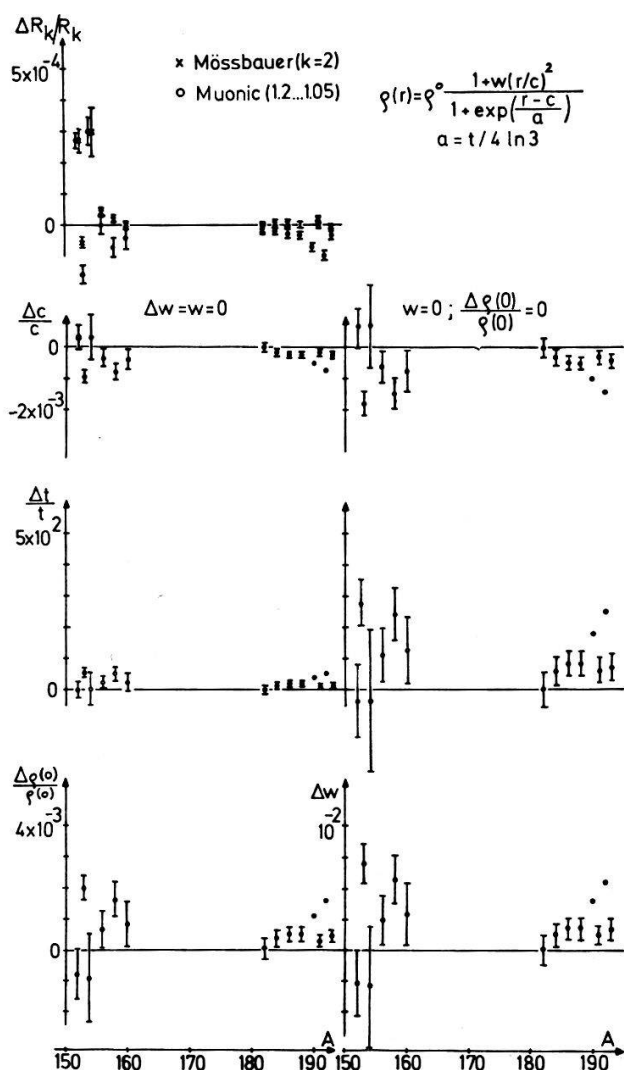


Figure 1
Analysis of isomer shifts (left top) in terms of a 2 parameter (left side) and 3 parameter Fermi distribution.

From the values $\Delta R_{K\mu}/R_{K\mu}$ and R_2/R_2 the changes of two parameters of the charge distribution were evaluated.

The results for a 2 parameter (left side) and a 3 parameter Fermi distribution with fixed central density $\rho(0)$ (right side) are given in the Figure for rotational states. The quantities $\Delta\rho(0)/\rho(0)$ and $\Delta\omega$ are determined by the normalization.

The points for ^{188}Os are obtained using preliminary Mössbauer results [7] indicating a very small isomer shift. The Figure shows, that the isomer shifts are produced by two cancelling effects, an increase in surface thickness and a decrease in radius. These quantities, in contrary to the isomer shifts themselves, behave very similar at both ends of the deformed region.

We have also tested different square well distributions of the charge density. The common result is the effect of centrifugal stretching together with a slight increase of charge density in the center for the excited states relative to the ground states. It should be repeated, that in this analysis no correction for nuclear polarization was applied neither to the muonic nor to the Mössbauer data.

References

- [1] R. BAADER, H. BACKE, R. ENGFER, K. HESSE, E. KANKELEIT, U. SCHRÖDER, K. H. WALTER and K. WIEN, *Phys. Lett.* 27 B, 425 (1968).
- [2] H. BACKE, R. ENGFER, U. JAHNKE, E. KANKELEIT, K. H. LINDENBERGER, C. PETITJEAN, H. SCHNEUWLY, W. U. SCHRÖDER, H. K. WALTER and K. WIEN, *Hyperfine Interactions in Excited Nuclei*, Vol. 2, ed. by G. GOLDRING and R. KALISH (Gordon and Breach, New York 1971), p. 723.
- [3] H. K. WALTER, H. BACKE, R. ENGFER, E. KANKELEIT, C. PETITJEAN, H. SCHNEUWLY and W. U. SCHRÖDER, to be published.
- [4] K. W. FORD and J. G. WILLS, *Phys. Rev.* 185, 1429 (1969).
- [5] G. K. SHENOY and G. M. KALVIUS, preprint, to be published.
- [6] A. FAESSLER and R. K. SHELINE, *Phys. Rev.* 148, 1003 (1966).
- [7] J. KLETA, Diplomarbeit T.H. Darmstadt (1970), unpublished.

Spectra of Neutrons from μ -Capture in Ca, Tl, Pb, and Bi

by U. JAHNKE¹), K. H. LINDENBERGER¹), G. RÖSCHERT¹), W. U. SCHRÖDER²), H. BACKE²),
R. ENGFER³), E. KANKELEIT²), H. SCHNEUWLY⁴), J. L. VUILLEUMIER³) and H. K. WALTER
(CERN, Geneva, Switzerland)

Experiments [1], [2] have indicated that μ -capture in complex nuclei is accompanied by the emission of neutrons and γ -rays from the de-excitation of the final nucleus. The spectra of neutrons and capture γ -rays are expected to be characteristic for the capture mechanism and the intermediate states excited in μ -capture. It seems to be particularly interesting to investigate light nuclei, where the resonance capture theory predicts dominant structure in the neutron spectra [3], [4]. More detailed information can be obtained, in principle, from correlation experiments measuring neutrons and de-excitation γ -rays in coincidence.

¹) Visitor from Hahn-Meitner-Institut, Berlin, Germany.

²) Visitor from Institut für Technische Kernphysik der T.H. Darmstadt, Germany.

³) Visitor from SIN, Zürich, Switzerland.

⁴) Visitor from Institut de Physique de l'Université Fribourg, Switzerland.

This paper reports on a correlation experiment, where the spectra of neutrons and of the associated de-excitation γ -rays, emitted after μ -capture in Ca, Tl, Pb, and Bi, were measured two-dimensionally. For the first time, the neutron energy was determined directly using a γ - n time-of-flight technique. Here, the γ -rays provided time zero signals to start the time-of-flight measurement. In this way, the measurement was restricted to neutron transitions leading to excited final states.

The experiments were performed at the CERN muon channel. Natural metallic targets of 2 to 4 g/cm² effective thickness were used. A muon stop in the target was defined by a conventional counter telescope. The time-of-flight spectrometer consisted of 2" \times 2" diameter NaI counter detecting the delayed capture γ -rays and a 2" \times 5" diameter NE213 neutron detector with pulse-shape discrimination for rejecting the high γ background. In the Ca run, a 4" \times 4" diameter NaI detector and four 2" \times 5" diameter neutron detectors were used. The flight distances used were 1 m and 0.5 m. The total time resolution was 3 to 4 nsec. The coincidence counting rates were typically 0.1 to 0.3 per sec, at a flight distance of 1 m. The Ca results have to be considered as preliminary, since the γ -background was only rejected to $\sim 25\%$. Details on the experiments are reported elsewhere [5].

The resulting total neutron spectra are shown in Figures 1 and 2. The energy resolution is indicated by the horizontal bars at the bottom. All spectra consist mainly of an evaporation part at energies below 5 MeV from the decay of highly excited compound states. An exponentially decreasing contribution of high-energy neutrons follows, which is attributed to the direct-emission process. The lines shown in the figures represent evaporation fits corresponding to nuclear temperatures T of (1.09 ± 0.04) MeV, (1.22 ± 0.06) MeV, (1.06 ± 0.05) MeV, and (1.13 ± 0.08) MeV, for Tl, Pb, Bi, and Ca, respectively. The bottom part of Figure 2 shows the spectrum, where the evaporation fit has been subtracted. Neglecting the pronounced structure

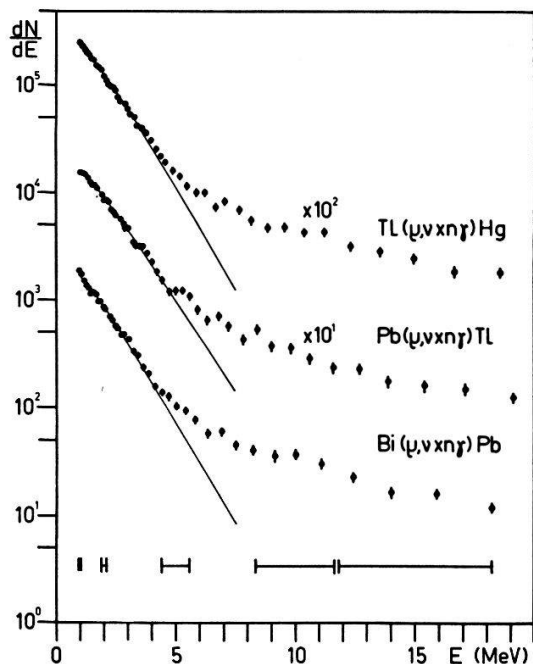


Figure 1

Spectra of neutrons from μ -capture in Tl, Pb and Bi. The lines represent evaporation fits.

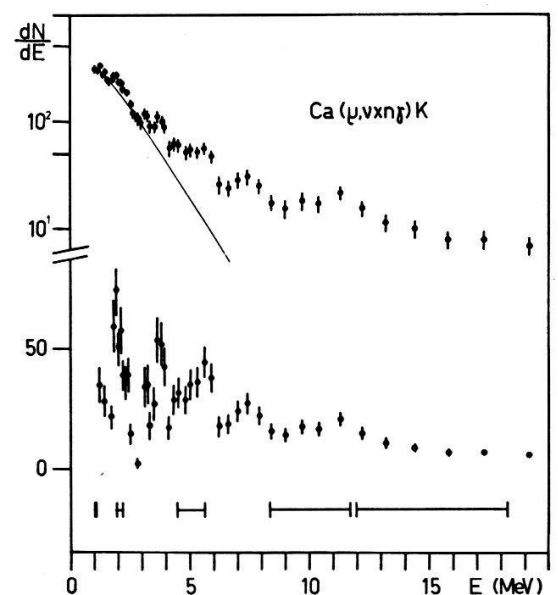


Figure 2

Spectrum of neutrons from μ -capture in Ca. Total spectrum at the top, evaporation subtracted at the bottom.

below 4 MeV in the Ca spectrum, one obtains $T = (1.35 \pm 0.07)$ MeV, which is close to the result of Evseev et al. [6]. The contribution of the high-energy neutrons drops exponentially with a decay constant between 8 and 9 MeV and amounts to $\sim 10\%$ of the total spectrum for Tl, Pb, and Bi.

The present results on Pb are consistent with those of Evseev et al. [6] and Krieger [7]; in their measurements, the ground-state neutron transitions were not excluded. Evseev et al. also observed peaks in the Ca neutron spectrum at about the same positions as in this experiment; however, the peak at ~ 3.5 MeV seems to be absent in their spectrum. This could be explained by a ground-state transition filling up the valley at ~ 3 MeV.

At present, no significant differences between the neutron spectra corresponding to different excited final states could be established. This is due to the lack of statistics and the high Compton background in the γ spectra. However, the results indicate that resonant states in ^{40}K are excited by μ -capture in ^{40}Ca , which decay dominantly into the first three excited states in ^{39}K . As lower limits for the locations of these states the region between ~ 12 and ~ 21 MeV in ^{40}K can be deduced. Since this is the region of the isobaric analogues of the giant resonances in ^{40}Ca , the present experiment supports the resonance capture mechanism.

References

- [1] B. McDONALD, J. A. DIAZ, S. N. KAPLAN and R. V. PYLE, *Phys. Rev.* **139 B**, 1253 (1965).
- [2] G. BACKENSTOSS, S. CHARALAMBUS, H. DANIEL, W. D. HAMILTON, U. LYNEN, CH. VON DER MALSBERG, POELZ G. and H. P. POVEL, *Nucl. Phys. A* **162**, 541 (1971).
- [3] V. V. BALASHOV, V. B. BELIAEV, R. A. ERAMJIAN and N. M. KABACHNIK, *Phys. Lett.* **9**, 168 (1964).
- [4] H. ÜBERALL, *Phys. Rev.* **139 B**, 1239 (1965).
- [5] W. U. SCHRÖDER, Thesis, T. H. Darmstadt, 1971, to be published.
- [6] V. EVSEEV, T. KOZŁOWSKI, V. ROGANOV and J. WOJTKOWSKA, *High-Energy and Nuclear Structure* (Plenum Press, New York-London 1970), p. 157.
- [7] M. H. KRIEGER, Thesis, NEVIS-172 (Columbia University, 1969).

Der Verlauf des Wirkungsquerschnittes der elastischen Streuung von Protonen an ^9Be im Bereich der $^9\text{Be}(p, n)^9\text{B}$ -Schwelle ($E_p = 2,060$ MeV)

von W. AUWÄRTER und V. MEYER
(Physik-Institut der Universität Zürich)

Publikation folgt.

Proton Induced Quasi Elastic Reactions in ^3He

by J. C. ALDER¹⁾, W. DOLLHOPF, W. J. KOSSLER and C. F. PERDRISAT
(College of William and Mary),

W. K. ROBERTS (NASA Lewis Research Center),

P. KITCHING, G. MOSS and W. C. OLSEN (University of Alberta)

J. R. PRIEST (Miami University)

A paper will be published elsewhere.

¹⁾ Fellow of the Swiss Institute for Nuclear Research (SIN).

The Reaction ${}^6\text{Li}(p, p d) {}^4\text{He}$ at 590 MeV and α - d Clustering in ${}^6\text{Li}$

by J. C. ALDER¹), W. DOLLHOPF, W. J. KOSSLER and C. F. PERDRISAT
(College of William and Mary),

W. K. ROBERTS (NASA Lewis Research Center),

P. KITCHING, G. MOSS and W. C. OLSEN (University of Alberta).

J. R. PRIEST (Miami University)

A paper will be published elsewhere.

Backward Elastic PD Scattering at 316, 364, 470 and 590 MeV

by J. C. ALDER¹), W. DOLLHOPF, C. LUNKE¹) and C. F. PERDRISAT
(College of William and Mary),

W. K. ROBERTS (NASA Lewis Research Center),

P. KITCHING, G. MOSS and W. C. OLSEN (University of Alberta)

J. R. PRIEST (Miami University)

A paper will be published elsewhere.

Analyse en déphasages de la diffusion élastique p - d à $E_{CM} = 2,0, 2,7, 3,3,$ et $3,8$ MeV

par P.-A. SCHMELZBACH, G. SARATZ, W. GRÜEBLER, R. E. WHITE, V. KÖNIG, R. RISLER
et P. MARMIER

(Laboratoire de Physique Nucléaire de l'ETH, Zurich)

Une nouvelle analyse en déphasages de la diffusion élastique p - d a été réalisée. Elle est basée sur les sections efficaces de Kocher et Clegg [1], le pouvoir d'analyse de la diffusion ${}^2\text{H}(\vec{p}, p){}^2\text{H}$ observé par Clegg et Haeberli [2] et les pouvoirs d'analyse $i T_{11}, T_{20}, T_{21}$ et T_{22} de la diffusion $\text{H}(\vec{d}, d)\text{H}$ mesurés à l'aide du faisceau polarisé de l'ETH [3].

Le formalisme utilisé [4] tient compte de la non-dégénérescence en J et des couplages dus à la non-conservation du moment angulaire orbital et du spin de la voie.

¹) Fellow of the Swiss Institute for Nuclear Research (SIN).

Le programme de Trächslin et al. [5] a été complété par l'introduction de déphasages complexes. On a considéré les ondes partielles jusqu'à $L = 4$, les déphasages des ondes F et G n'étant cependant pas séparés en J .

L'introduction des couplages n'est pas nécessaire à l'ajustement des sections efficaces, de la polarisation des protons et de iT_{11} . Elle est par contre indispensable à la reproduction correcte des pouvoirs d'analyse tensoriels, en particulier de T_{21} . Les figures 1 et 2 montrent les ajustements obtenus pour les pouvoirs d'analyse de la diffusion $H(\vec{d}, d)H$.

A l'exception des doublets 2P et 2D , les déphasages obtenus diffèrent peu de ceux trouvés dans d'autres analyses [6]. Les couplages les plus importants sont observés entre les états ${}^2S_{1/2}$ et ${}^4D_{1/2}$ et entre les états ${}^4P_{1/2}$ et ${}^2P_{1/2}$.

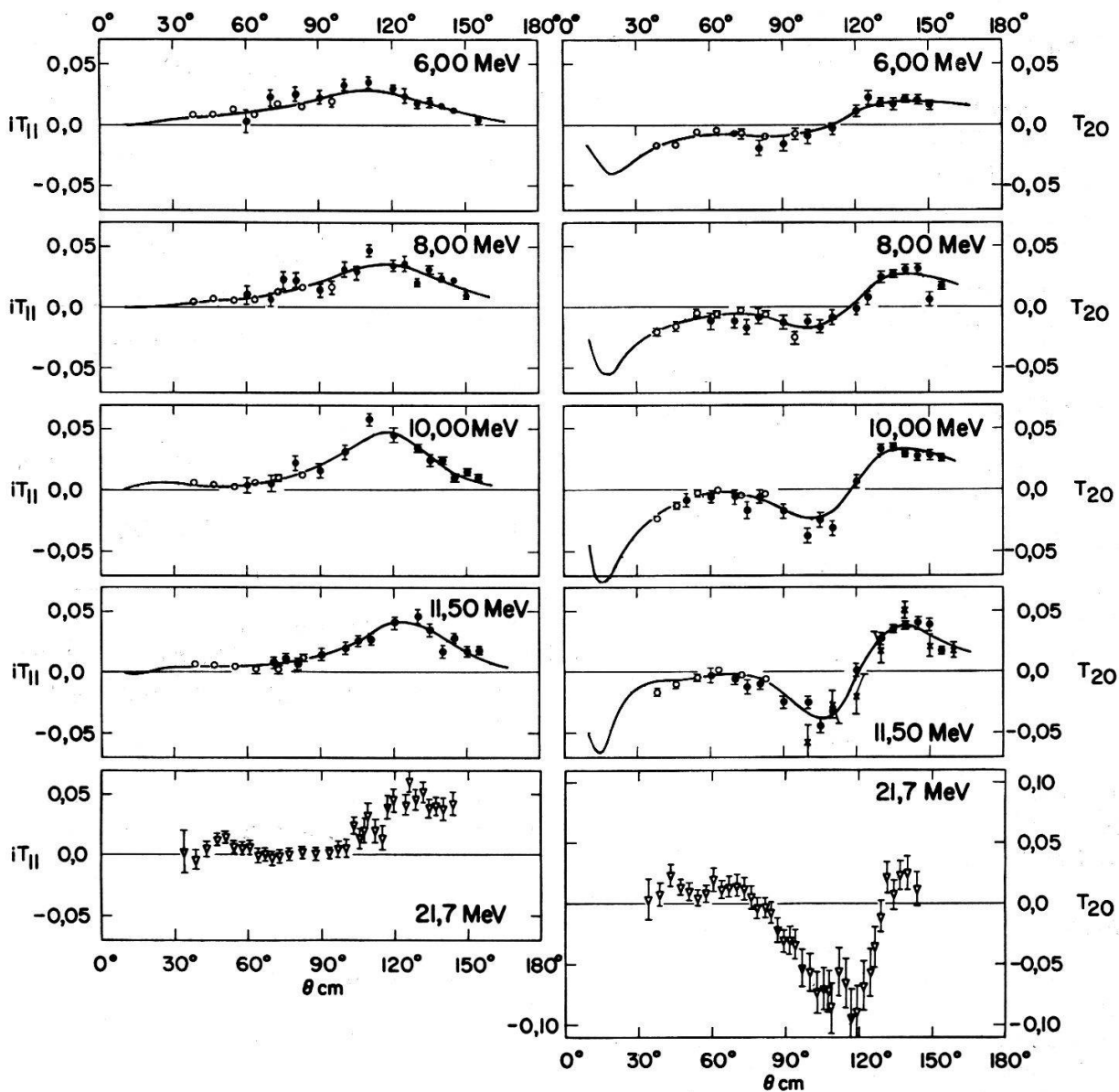


Figure 1

Ajustements aux pouvoirs d'analyse iT_{11} et T_{20} de la diffusion $H(\vec{d}, d)H$. Les énergies des deutons incidents sont données dans la figure. On montre également les mesures de Arvieux et al. à 21,7 MeV [7].

Les séparations en J sont déterminées de manière peu précise par les données expérimentales utilisées. Les paramètres de Wolfenstein prédits par l'analyse semblent très peu sensibles à une inversion de la séquence du doublet 2D .

Un article détaillé est en préparation.

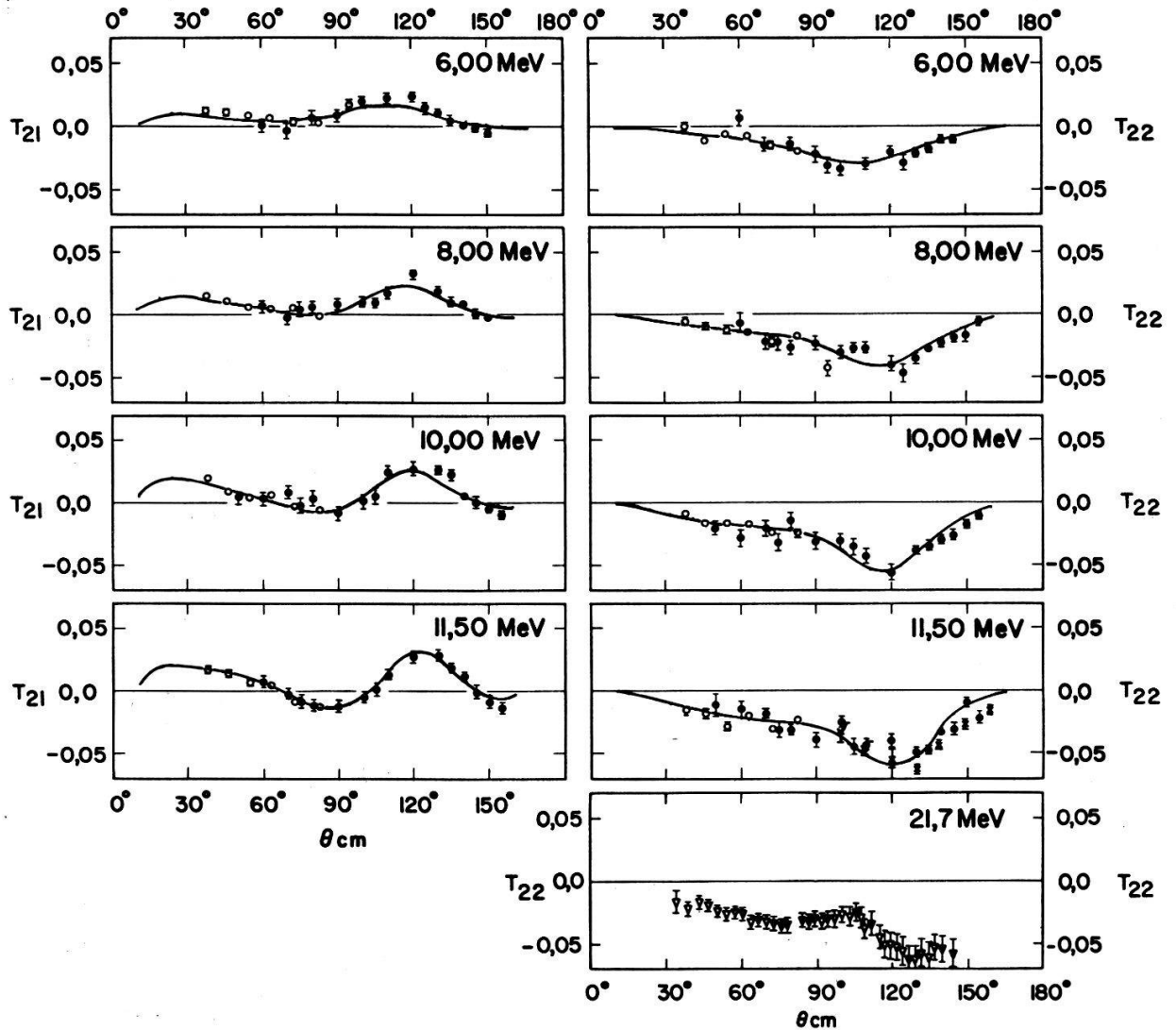


Figure 2

Ajustements aux pouvoirs d'analyse T_{21} et T_{22} de la diffusion $H(\vec{d}, d)H$. Les énergies des deutons incidents sont données dans la figure. On montre également les mesures de Arvieux et al. à 21,7 MeV [7].

Références

- [1] D. C. KOCHER et T. B. CLEGG, Nucl. Phys. A 132, 455 (1969).
- [2] T. B. CLEGG et W. HAEBERLI, Nucl. Phys. A 95, 608 (1967).
- [3] R. E. WHITE, W. GRÜEBLER, V. KÖNIG, R. RISLER, A. RUH, P. A. SCHMELZBACH et P. MARMIER, Nucl. Phys. A 180, 593 (1972).
- [4] R. G. SEYLER, Nucl. Phys. A 124, 253 (1969).
- [5] W. TRÄCHSLIN, L. BROWN, T. B. CLEGG et R. G. SEYLER, Phys. Lett. 25 B, 585 (1967).
- [6] R. BRÜNING, Dissertation, Hamburg 1970.
- [7] J. ARVIEUX, R. BEURTEY, J. GOUDERGUES, M. MAYER, A. PAPINEAU et J. THIRION, Nucl. Phys. A 102, 503 (1967).

Blocking-Effekt bei der Uranspaltung mit 14-MeV-Neutronen

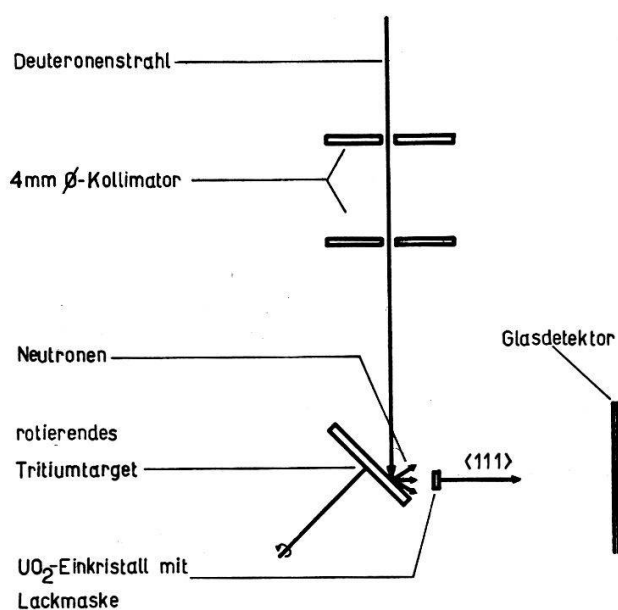
VON U. NOELPP, R. ABEGG, J. SCHACHER UND R. WAGNER

(Physikalisches Institut der Universität Basel)

Die Spaltung von ^{238}U mit schnellen Neutronen kann über verschiedene Kanäle verlaufen: (n, f) , (n, nf) , $(n, 2nf)$, . . . An der Schwelle der Reaktion $^{238}\text{U}(n, 2nf)$, die bei einer Neutronen-Einschuss-Energie von ungefähr 14 MeV liegt, sind besonders interessante Effekte festzustellen (Lebensdauer des Zwischenkerns, Winkelanisotropie der Spaltfragmente). Im folgenden beschreiben wir die Methode, mit der die Lebensdauer des Zwischenkerns dieser Reaktion bestimmt werden soll.

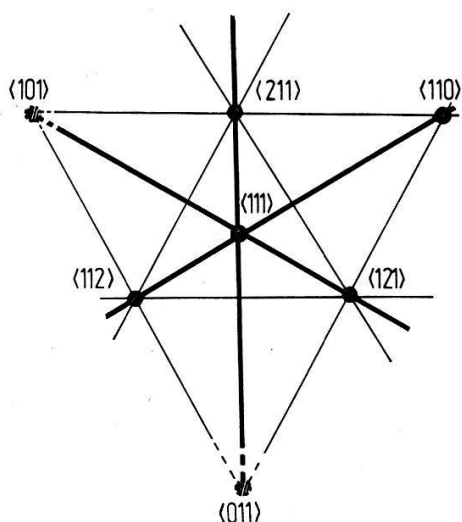
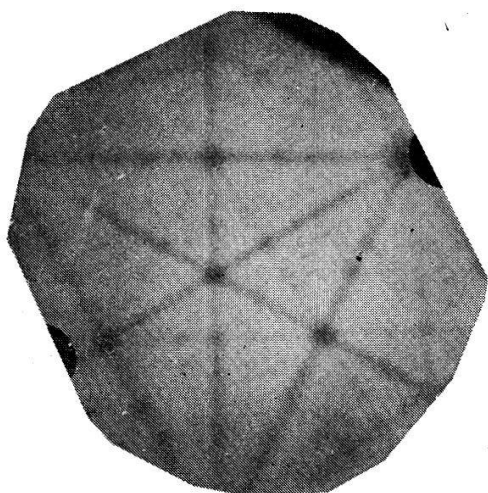
Ein UO_2 -Einkristall, den uns Whitton von den Chalk River Nuclear Laboratories freundlicherweise zur Verfügung gestellt hat, wird mittels Protonblocking [1] orientiert (Fig. 2). Anschliessend wird der Kristall, auf den eine Maske mit einem Durchmesser von 1,5 mm aufgebracht war, in der Anordnung von Figur 1 mit 14-MeV-Neutronen bestrahlt. Aus dem Kristall emittierte Spaltfragmente treffen auf einen Glasdetektor. Durch Ätzen sichtbar gemachte Spaltfragment-Spuren [2] wurden bei seitlichem Lichteinfall photographiert (Fig. 3). Die Schattenstruktur dieses Fragmentogramms stimmt mit derjenigen des Protonogramms (Fig. 2) überein. Nach Gibson und Nielsen [3] kann aus einem Paar von Fragmentogrammen, aufgenommen unter zwei verschiedenen Winkeln zwischen einfallenden Neutronen und emittierten Fragmenten, die Lebensdauer des Zwischenkerns bestimmt werden.

Nachdem es gelungen ist, bei einer mit 14-MeV-Neutronen ausgelösten Uran-Spaltung ein Fragmentogramm zu erhalten, planen wir, ein Paar von Fragmentogrammen unter zwei verschiedenen Winkeln bei grösserer Distanz aufzunehmen. Die Analyse der Schattenform sollte uns eine Bestimmung der Zwischenkernlebensdauer erlauben.



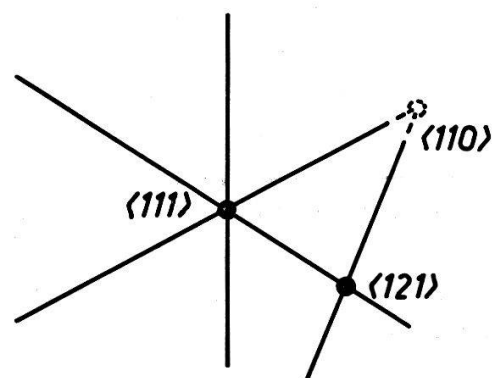
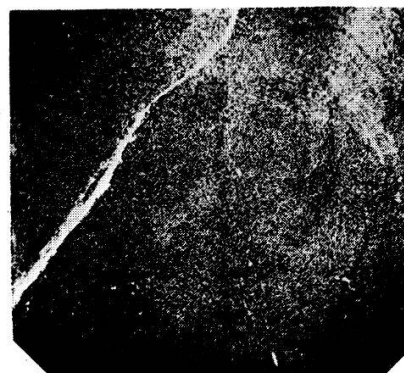
Figur 1

Anordnung zur Aufnahme von Fragmentogrammen. Die 14-MeV-Neutronen wurden mit der Reaktion $T(d, n)^4\text{He}$ erzeugt (Deuteronenenergie: 150 keV).



Figur 2

Protonogramm eines UO_2 -Einkristalls und geometrische Interpretation des Blocking-Musters ($\langle 111 \rangle$ -Achse normal zur Aufnahmeebene, Protonenenergie: 140 keV).



Figur 3

Fragmentogramm eines UO_2 -Einkristalls und geometrische Interpretation des Blocking-Musters ($\langle 111 \rangle$ -Achse normal zur Aufnahmeebene, mit einer Glasplatte detektiert).

Literatur

- [1] A. F. TULINOV, Soviet Phys.-Dokl. 10, 463 (1965).
- [2] R. L. FLEISCHER, P. B. PRICE und R. M. WALKER, Ann. Rev. Nucl. Sci. 15, 1 (1965).
- [3] W. M. GIBSON und K. O. NIELSEN, Proc. of II. Symposium of the Physics and Chemistry of Fission, Vienna, 1969.

Dispositif à grande dynamique pour l'identification des particules chargées

par J. P. PERROUD, C. SELLEM et J. F. LOUDE

(Institut de Physique Nucléaire de l'Université de Lausanne)

Un dispositif d'analyse triparamétrique comprenant un télescope (mesure et codage de l'énergie restante, de la perte d'énergie et du temps de vol des particules chargées) et des programmes permettant l'analyse en temps différé est en fonctionne-

ment. Ce dispositif permet d'identifier sans ambiguïtés les particules chargées provenant des réactions $X(n, \text{particules chargées})$ à $E_n = 14$ MeV pour autant que le télescope soit adapté à la dynamique sur la perte d'énergie des particules chargées considérées.

Les performances de deux télescopes ont été déterminées au moyen des réactions $H(n, p)$, $D(n, \text{particules chargées})$ et respectivement $Li_{(nat)}(n, \text{particules chargées})$ et $^{10}B(n, \text{particules chargées})$. Le premier qui comprend deux compteurs proportionnels et un détecteur à barrière de surface, convient bien lorsque la dynamique sur la perte d'énergie n'est pas trop grande; le deuxième, constitué d'un compteur proportionnel, d'un détecteur mince et d'un détecteur épais à barrière de surface est bien adapté aux grandes dynamiques.

Mesure de l'efficacité de scintillateurs organiques pour des neutrons de 30 à 150 MeV

par R. JENEFSKY, C. JOSEPH, B. VAUCHER et E. WINKELMANN
(Institut de Physique Nucléaire de l'Université de Lausanne),

T. BRESSANI, E. CHIAVASSA et G. VENTURELLO
(Istituto di Fisica dell'Università di Torino),

H. SCHMITT et C. ZUPANCIC
(Sektion Physik, Universität München)

L'efficacité absolue de détecteurs utilisant des scintillateurs organiques NE 102 ($19 \times 19 \times 10$ cm) ou NE 223 ($19 \times 19 \times 5$ cm) a été mesurée pour des neutrons d'énergies entre 30 et 140 MeV. Ces neutrons ont été produits par la diffusion d'un faisceau de neutrons sur une cible d'hydrogène liquide. L'énergie et l'angle des protons de recul ont été mesurés à l'aide d'un spectromètre magnétique équipé de chambres proportionnelles multifils, définissant ainsi l'énergie et le flux des neutrons émis dans l'angle solide conjugué. La fraction de ce flux interceptée par les détecteurs de neutrons a été calculée par un programme de Monte-Carlo. L'efficacité a été mesurée pour un détecteur isolé et pour plusieurs détecteurs accolés.

Performances of a Proportional Chamber with Intermediate High Voltage Planes

by D. AEBISCHER, R. HESS, R. MARCOLI, J.-C. NIKLÈS and D. W. WERREN
(University of Geneva),

A. JUNOD (ETH, Zürich) and C. SERRE (University of Grenoble)

Much progress [1] has been reported on the performance of multiwire proportional chambers (MWPC), since the first realisation by Charpak [2]. Here we present some results on a possible method to increase the signal amplitude on the wires. The final goal is to reduce the expensive amount of electronics needed by MWPC. Navarro [3] pointed out that the region of electron multiplication around the wires can be enlarged by introducing two intermediate high voltage planes, carefully

designed. Following this idea we built the chamber shown in Figure 1. The properties of this chamber were studied [4] using the 'magic' gas mixture, Argon + Isobutane + Freon [7].

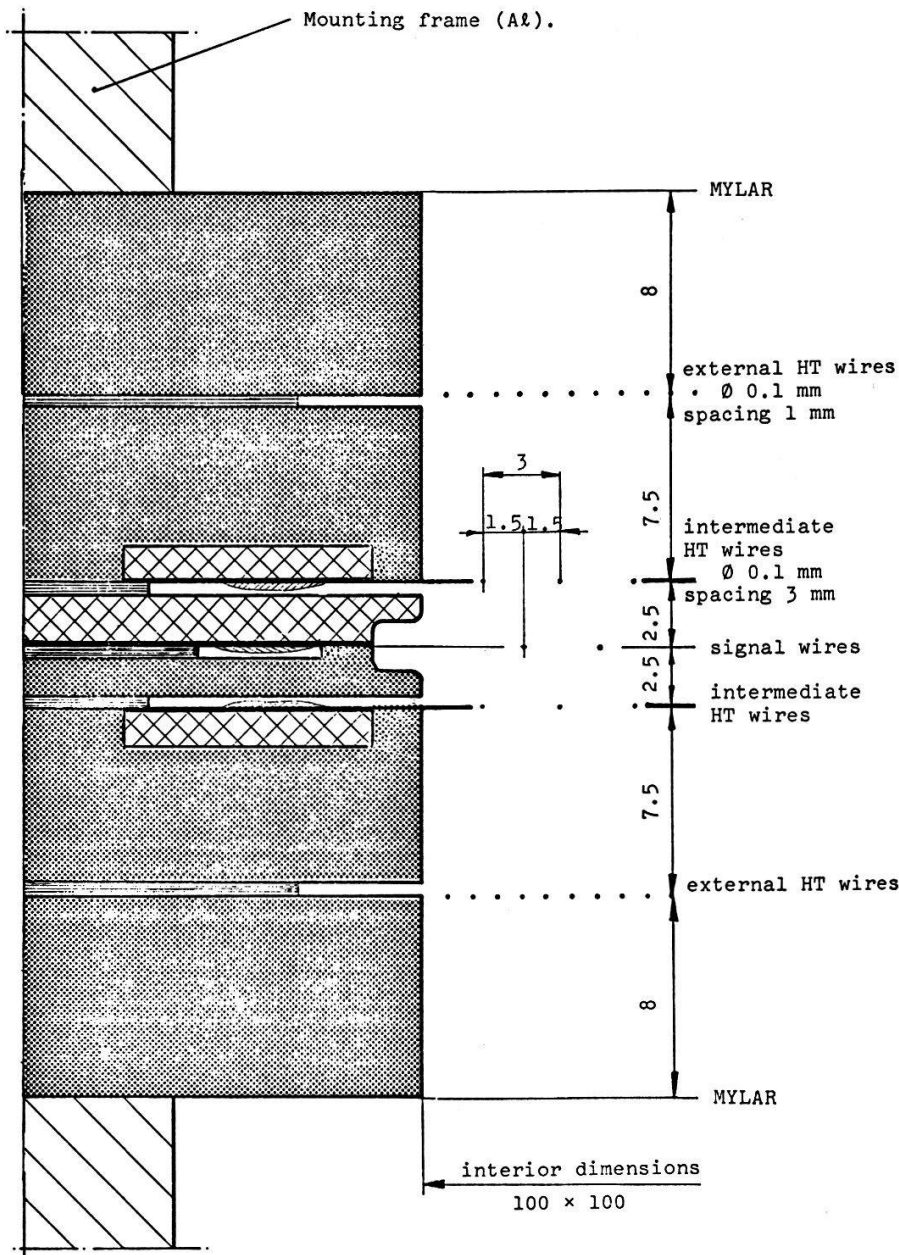


Figure 1

Schematic diagram of the chamber. The signal wires are gold-plated molybdenum, $\varnothing = 40 \mu$.

Amplitude vs high voltage and gas mixtures

A ^{90}Sr β -source was used in these measurements. Signals were observed directly on the wires which were connected to ground by 5,6 k Ω resistors. Figure 2 shows that the amplitude A satisfies the Rose and Korff law [5], $A \doteq \exp(H T)$. As expected the intermediate plane has a greater influence than the external one. Notice that signals up to 1,5 Volt have been obtained. Figure 3 indicates the variation of the amplitude for different gas ratios. Increasing the amount of Isobutane reduces the sensitivity of the amplitude to high voltage but allows us to reach higher voltages and thus obtain greater amplitude. The same is true for Freon.

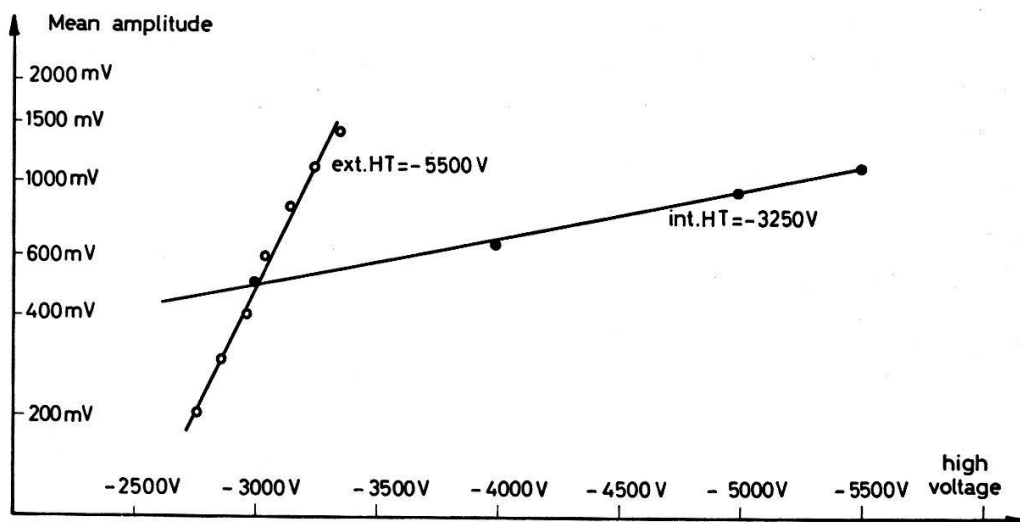


Figure 2

Amplitude vs. high voltage. ● = intermediate planes, ○ = external planes. Isobutane/Argon = 54%; Freon/Argon = 1%.

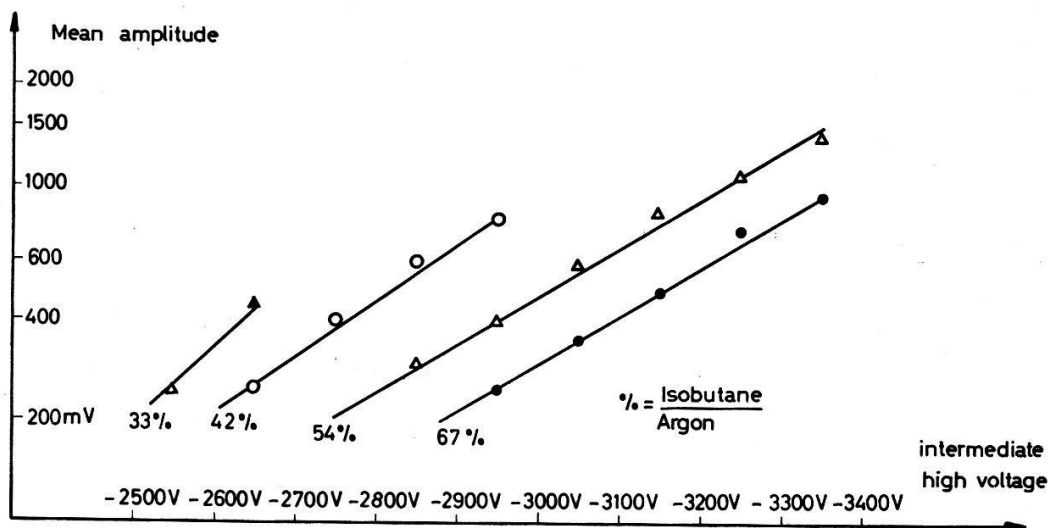


Figure 3

Amplitude vs. gas mixture Isobutane/Argon and int. HT. Ext. HT = - 5500 V; Freon/Argon = 1%.

Efficiency and time resolution

The chamber then was put in a 400 MeV proton beam of $\sim 10^4$ p/sec intensity at the CERN SC. The amplifiers [6] connected to the wires had an input resistor of 1 k Ω and a trigger level of 150 mV. Figure 4 shows the efficiency of the chamber relative to the coincidence of two scintillation counters positioned before and behind the chamber respectively.

The time resolution was obtained by differentiating the curve 'efficiency vs delay of the scintillation counter coincidence'. After corrections for proper delay of each amplifier we found a standard deviation assuming a gaussian distribution of $\sigma = 9$ nsec.

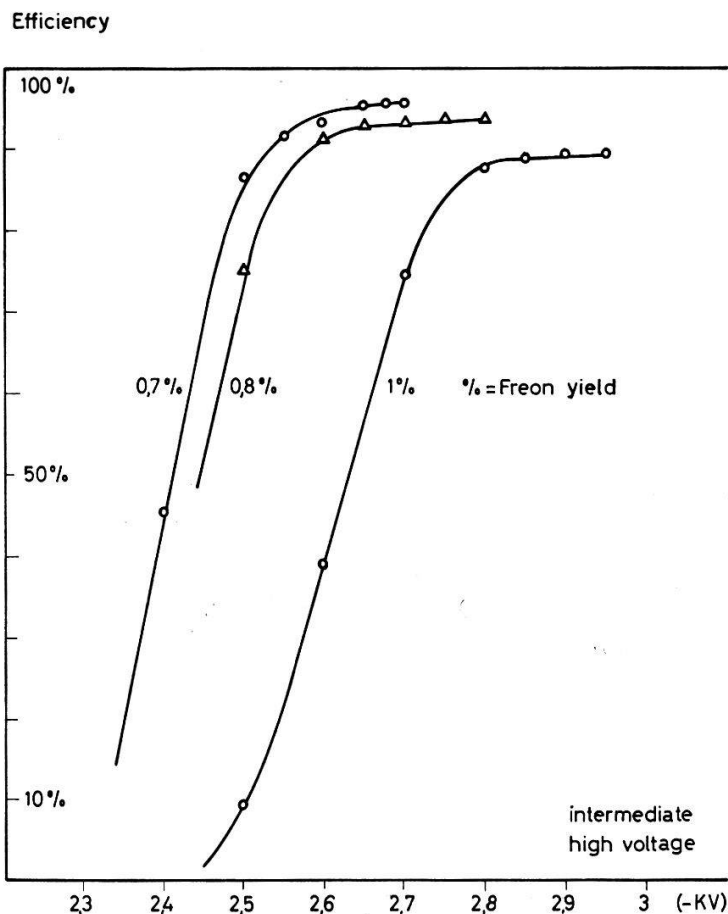


Figure 4
Global efficiency vs. intermediate high voltage. Ext. HT = - 6500 V; Isobutane/Argon = 42%.

Acknowledgments

We wish to thank Prof. Heer for his continuous interest in this work and Dr. Michaelis for the hospitality in the CERN MSC division.

References

- [1] G. CHARPAK et al., *The evolution of Filmless Spark Chambers*, CERN 1970 (Annual Review of Nuclear Science).
- [2] G. CHARPAK et al., *N.I.M.* 62, 262 (1968).
- [3] A. NAVARRO, *Réalisation d'une chambre proportionnelle multiplan* (Thèse, Strasbourg 1970).
- [4] R. MARCOLI, *Etude et réalisation d'une chambre proportionnelle multiplan* (Travail de diplôme, DPNCUG, Genève 1971).
- [5] M. E. ROSE and S. A. KORFF, *Phys. Rev.* 59 (1941).
- [6] J. C. TARLÉ and H. VERWEIJ, *Nucl. Instr. Methods* 78, 93 (1970).
- [7] R. BOUCLIER et al., *Nucl. Instr. Methods* 88, 149 (1970).

Un système rapide de codage et d'acquisition pour un ensemble de chambres multifils proportionnelles

par D. AEBISCHER, R. HESS, J.-C. NIKLÈS et D. WERREN
(Université de Genève),

A. JUNOD (ETH, Zurich) et C. SERRE (Université de Grenoble)

Ce système de codage a pour fonction de rendre plus compacte l'information stockée dans les mémoires reliées chacune à un des fils des chambres multifils proportionnelles.

La description du système fait l'objet d'une publication détaillée [1], à laquelle nous renvoyons le lecteur pour les détails.

Référence

- [1] D. AEBISCHER et al., *Nucl. Instr. Methods* 99, 405 (1972).

Post-Deadline-Papers

Mesure par RPE de la destruction par du C_4H_8 d'ions oxygène absorbés sur du SnO_2 et du TiO_2 et leurs relations avec l'activité catalytique des oxydes en question

par C. HAUSER

(Laboratoire d'Optique physique EPF, Lausanne)

Nous avons mesuré la vitesse de destruction par du C_4H_8 d'ions oxygène absorbés sur du SnO_2 et TiO_2 préalablement réduits. Par spectrométrie de masse, nous avons analysé les produits de formation. Différentes constatations ont été faites

- a) les centres semblent groupés sur quelques cristallites seulement;
- b) l'évolution de la conductibilité ainsi que l'apparition des produits de réaction longtemps après la disparition du signal RPE donne à penser que ces centres ne sont pas, ou du moins pas uniquement, responsable de l'activité catalytique de la surface.

Calcul d'une forme de raie de RPE à 3 valeurs de g pour une poudre en incluant une distribution anisotrope des largeurs de raies

par C. HAUSER et B. RENAUD

(Laboratoire d'Optique physique EPF, Lausanne)

Dans ce travail, nous avons calculé théoriquement la forme d'une raie de RPE pour une poudre en tenant compte d'une dépendance de l'orientation des largeurs de raies. Cette distribution a été prise ellipsoïdale coaxiale avec les directions principales du tenseur g (tous les calculs de ce genre faits jusqu'à ce jour, n'ont jamais inclus une distribution spatiale des largeurs de raies). Ce calcul a été ensuite porté sur ordinateur. Un programme de calcul des trois valeurs principales du champ et des largeurs de raies à partir d'une courbe expérimentale a été établi. Un exemple a été fait pour le cas d'un signal d'absorption d' O_2 sur du SnO_2 partiellement réduit.

Nullfeldaufspaltung der B-Linie in stickstoffdotiertem GaP

von L. KRAUSBAUER, R. K. WEHNER und W. CZAJA

(Laboratories RCA Ltd., Zürich)

Photolumineszenzspektren von N-dotiertem GaP zeigen bei tiefen Temperaturen ein Paar von Emissionslinien (A und B), die durch den strahlenden Zerfall eines Exzitons, gebunden an Stickstoff, hervorgerufen werden. Wir haben die B-Linie mit hoher Auflösung gemessen, um aus der Linienform Information über eventuelle Kristallfeld- und Jahn-Teller-Effekte des Stickstoff-Exziton-Komplexes zu erhalten [1]. Da die Halbwertsbreite der B-Linie nur etwa dreimal so gross ist wie die Halbwertsbreite unserer Spektrometerfunktion, war eine Entfaltung der Messkurve notwendig.

Dazu haben wir das Verfahren von Weise [2] angewandt und folgendermassen modifiziert: Die Dämpfung der unphysikalischen Oszillationen, die durch Schwankungen in der Messkurve, wie z. B. Messfehler, bei jeder Entfaltung auftreten, wird frequenzabhängig. Die Dämpfung wird dabei der Struktur der speziellen Messkurve angepasst und hängt ausserdem auch noch von der unterschiedlichen Messgenauigkeit der einzelnen Messpunkte ab. Eine ausführliche Darstellung des Verfahrens ist in Vorbereitung.

Nach der Entfaltung zeigt die B-Linie 2 Komponenten, deren energetischer Abstand 0,05–0,08 meV beträgt. Dieser Wert lässt sich nicht sehr genau bestimmen, da die Intensitäten der beiden Komponenten sehr unterschiedlich und ausserdem beide Komponenten relativ breit sind. Unseren direkt aus der Analyse der Linienform gewonnenen Wert von 0,05–0,08 meV für die Nullfeldaufspaltung der B-Linie ist mit dem von Yafet und Thomas [3] vor einiger Zeit indirekt aus der Anisotropie der Aufspaltung der A- und B-Linie im Magnetfeld abgeschätzten Wert von maximal 0,05 meV zu vergleichen. Die gute Übereinstimmung beider Werte deutet darauf hin, dass in beiden Fällen der gleiche Effekt beobachtet wurde. Ob die Nullfeldaufspaltung auf einem Jahn-Teller-Effekt oder einem Kristallfeld beruht, kann im Augenblick noch nicht entschieden werden.

Literatur

- [1] Entsprechende Messungen und Analysen für den Bi-Exziton-Komplex ergeben eine Nullfeldaufspaltung der B-Linie von 0,28 meV, die einem Jahn-Teller-Effekt zugeschrieben wird. P. J. DEAN und R. A. FAULKNER, *Phys. Rev.* **185**, 1064 (1969); A. ONTON und P. N. MORGAN, *Phys. Rev. B* **1**, 2592 (1970).
- [2] K. WEISE, *Nucl. Instr. Meth.* **65**, 189 (1968).
- [3] Y. YAFET und D. G. THOMAS, *Phys. Rev.* **131**, 2405 (1963).

Zeeman-Effekt am gebundenen Exziton-Komplex (eeh) in GaP

von W. CZAJA, L. KRAUSBAUER und B. J. CURTIS

(Laboratories RCA Ltd., Zürich)

Stickstoff-Verunreinigungen in GaP wirken als isoelektronische Traps, und es ist seit längerem bekannt, dass Exzitonen (eh) und Exzitonkomplexe (eehh) schwach an die N-Verunreinigungen gebunden werden können. Wir haben vor einiger Zeit über einen weiteren Exziton-Komplex (eeh), gebunden an N-Verunreinigungen, berichtet [1]. Ein charakteristisches Linienspektrum wird beobachtet, das wir dem strahlenden Zerfall dieses gebundenen (eeh) Teilchens zugeschrieben haben. Messungen im Magnetfeld sind notwendig, um unsere Modellvorstellungen zu bestätigen.

Die zu erwartenden Aufspaltungen im Magnetfeld sowie die Intensitäten der einzelnen Zeemann-Komponenten [2] für dipol-erlaubte Übergänge, können näherungsweise berechnet werden, wenn ein isotropes Modell angenommen wird. Diese Voraussetzung ist für das gebundene exzitonische Molekül (eehh) recht gut erfüllt [3] und wird für den (eeh)-Komplex als brauchbare Näherung übernommen. Die *g*-Faktoren sind bekannt, wir übernehmen die Werte aus [4]. Die Übereinstimmung der Rechnung mit den bisher vorliegenden Messungen ist sehr gut, sowohl bezüglich

der Aufspaltung (Vergleich mit aufgelösten Zeeman-Komponenten) als auch bezüglich des Intensitätsprofils (nicht aufgelöste Zeeman-Komponenten). Dabei ist zu beachten, dass kein anpassbarer Parameter zur Verfügung steht.

Eine ausführliche Mitteilung ist in Vorbereitung.

Literatur

- [1] W. CZAJA, L. KRAUSBAUER und B. J. CURTIS, *Solid State Comm.* 8, 1159 (1970); 9, 657 (1971).
- [2] vgl. E. U. CONDON und G. H. SHORTLEY, *The Theory of Atomic Spectra* (Cambridge Univ. Press 1967).
- [3] J. L. MERZ, R. A. FAULKNER und P. J. DEAN, *Phys. Rev.* 188, 1228 (1969).
- [4] D. G. THOMAS, M. GERSHENZON und J. J. HOPFIELD, *Phys. Rev.* 131, 2397 (1963).

Kritische Phänomene in SbSI

VON E. F. STEIGMEIER und G. HARBEKE

(Laboratories RCA Ltd., Zürich)

Neben der ferroelektrischen «soft mode», die wir in SbSI beobachtet haben, finden wir in der Nähe des Curiepunktes (292°K) einen starken Anstieg der Rayleigh-Streuintensität. Dies wird interpretiert als kritische Lichtstreuung an Temperaturfluktuationen (Phononendichteschwankungen). Die integrierte Intensität liefert eine statische Suszeptibilität, deren Divergenz im Einklang ist mit direkten Messungen der statischen Dielektrizitätskonstanten $\chi \sim |T - T_c|^{-4/3}$. Weitere kritische Exponenten ergeben sich für die spontane Polarisierung (Ordnungsparameter) (1/3), die Frequenz der «soft mode» (1/3) und den singulären Anteil der Wärmeleitfähigkeit (2/3), die alle vom Landau-Verhalten abweichen, jedoch miteinander verträglich sind. Wir deuten dies als Evidenz für starke kritische Fluktuationen des Ordnungsparameters.

Eine ausführliche Arbeit findet sich in «Proceedings of the Nato Advanced Study Institute on Structural Phase Transitions and Soft Modes, Geilo, Norway, 13–20 April 1971 (Universitetsforlaget, Oslo 1971)» und in «Proceedings of the International Conference on Light Scattering in Solids, Paris, 19–23 July 1971 (Flammarion Press, Paris 1971)».

Das Verhalten der Kryodiode in supraleitenden Gleichrichteranlagen mit induktiver Last

VON RENÉ FASEL

(Laboratorium für Festkörperphysik der ETH, Zürich)

Ein bereits in früheren Veröffentlichungen [1], [2] beschriebenes und als Kryodiode bezeichnetes supraleitendes Gleichrichterelement wird in seinem Betriebsverhalten untersucht. Von Interesse ist dessen Verwendung in supraleitenden Gleichrichteranlagen mit induktiver Last. Es wird gezeigt, wie mit der Theorie konventioneller Stromrichtertechnik Ansätze für die Berechnung des Ladevorganges supraleitender Spulen mit derartigen Gleichrichtern erhalten werden können. Ladestrom,

Ausgangsspannung und anfallende elektrische Verluste werden in Abhängigkeit der Ladezeit berechnet und mit entsprechenden im Experiment gewonnenen Messdaten verglichen.

Literatur

- [1] R. FASEL und J. L. OLSEN, Proc. ICEC 2, 204 (Iliffe 1968).
 [2] R. FASEL und J. L. OLSEN, Bull. de l'Inst. Int. du Froid, Comm. 7 (1969).

Mössbauer-Effekt an Pt-195

von W. RÜEGG und J. P. LAUNAZ

(Laboratorium für Hochenergiephysik der ETH, Zürich)

Mit Hilfe einer ferromagnetischen Pt-Fe-Legierung (3 at.% Pt) wurde das magnetische Moment des 130-keV-Zustandes zu $\mu_{130} = 0,90 \pm 0,08$ nm bestimmt. Aus der Messung der Isomerieverschiebung des 130-keV- und des 99-keV-Überganges findet man für das Verhältnis der Differenz der quadratisch gemittelten Kernradien

$$\frac{\Delta\langle R^2 \rangle_{130}}{\Delta\langle R^2 \rangle_{99}} = 1,3 \pm 0,2.$$

Für PtO₂, PtCl₄, PtCl₂ und PtJ₂ wurde die Isomerieverschiebung am 99-keV-Übergang gemessen.

Physique appliqué

Echos de spins par inversion d'un gradient de champ magnétique

par B. BORCARD et G. J. BÉNÉ

(Département de Physique de la Matière Condensée, Université de Genève, Suisse)

Résumé. Les auteurs décrivent une méthode nouvelle d'obtention d'échos de spins, dans laquelle on inverse seulement le gradient du champ magnétique appliqué.

Il est bien connu que, dans les échos de spins [1], le rôle essentiel est joué par le gradient ΔH_0 du champ magnétique appliqué H_0 . Ce gradient, en effet, produit la dispersion spatiale des moments élémentaires et, après, par exemple, un renversement du référentiel, la refocalisation de ces moments élémentaires [2].

Le renversement du référentiel est habituellement produit par une impulsion convenable d'un champ RF , à la fréquence de Larmor, qui retourne l'aimantation par rapport au champ. On peut tout aussi bien inverser, au lieu de l'aimantation, le champ magnétique H_0 et son gradient ΔH_0 . Ceci a été réalisé pour la première fois dans le référentiel tournant par Solomon [3] puis ultérieurement dans le référentiel du laboratoire [4].

En fait, la partie homogène H_0 du champ appliqué fixe seulement la fréquence moyenne du phénomène, mais ne joue aucun rôle actif dans la production des échos de spins [5]. Ces derniers peuvent en particulier être obtenus comme l'a suggéré Abragam [6] lorsque le champ appliqué est la somme d'un champ homogène H_0 de grande amplitude et d'un plus petit champ inhomogène H'_0 : il suffit d'inverser seulement H'_0 pour produire les échos. Cette procédure a l'inconvénient que la valeur moyenne de H'_0 s'ajoute, ou se retranche, à H_0 , et que les échos sont alternativement aux fréquences $\gamma(H_0 + H'_0)$ et $\gamma(H_0 - H'_0)$ (γ = rapport gyromagnétique des noyaux envisagés).

Pour éviter cet inconvénient, au champ magnétique principal H_0 très homogène, on superpose un gradient «pur»: champ magnétique, fortement inhomogène, mais de valeur moyenne spatiale nulle, obtenu par exemple au moyen de deux bobines identiques, coaxiales, à enroulements inversés, et alimentées par le même courant I .

Il suffit d'inverser périodiquement le courant I pour obtenir des échos à la fréquence ω_0 ($= \gamma H_0$).

L'expérience a été réalisée très simplement en plongeant dans l'échantillon, de relativement grandes dimensions, les bobines productrices du gradient pur, dont l'axe est parallèle à celui du champ magnétique terrestre, très homogène, H_0 . A l'instant initial, les noyaux (ici les protons de l'eau pure) sont polarisés perpendiculairement à l'axe commun de H_0 et ΔH_0 selon la technique de Packard et Varian [7] et le gradient «pur» est inversé aux instants $\tau, 3\tau, 5\tau \dots$ (τ grand devant la période de Larmor, mais petit devant le temps de relaxation). Les échos sont observés aux instants $2\tau, 4\tau \dots$. Un courant de quelques milliampères est suffisant pour produire le gradient «pur». La figure représente les échos obtenus par cette méthode.

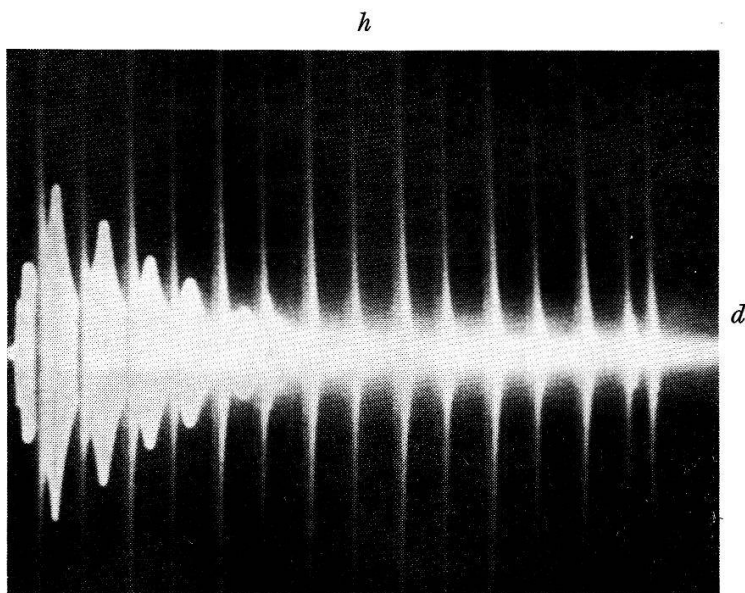


Figure 1
Echos de spins obtenus par inversion du gradient du champ magnétique.

Dans la représentation familière de Hahn [8] où l'on compare le mouvement des spins à celui des coureurs sur une piste, c'est évidemment l'inhomogénéité du champ qui provoque la dispersion progressive des moments. Lorsqu'on inverse, à l'instant τ , le gradient, les coureurs conservent leur vitesse moyenne, en grandeur et en direction,

mais ceux qui étaient les plus rapides sont maintenant les plus lents et inversement: ils seront de nouveau tous groupés à l'instant 2τ .

On peut imaginer la même expérience en supprimant le champ homogène H_0 , mais alors l'écho est apériodique et contient tout le spectre de fréquences correspondant aux valeurs du champ produit par les bobines.

Références

- [1] E. L. HAHN, Phys. Rev. 80, 580 (1950).
- [2] G. J. BÉNÉ, Pure appl. Chem. (in press).
- [3] I. SOLOMON, Phys. Rev. Lett. 2, 301 (1959).
- [4] B. BORCARD, E. HILTBRAND et G. J. BÉNÉ, C. r. Acad. Sci. Paris, B 268, 1446 (1969).
- [5] G. J. BÉNÉ, C. r. Acad. Sci. Paris, B 271, 1235 (1970).
- [6] A. ABRAGAM, *The principles of nuclear magnetism* (Clarendon Press, Oxford 1961), p. 63.
- [7] M. PACKARD et R. VARIAN, Phys. Rev. 93, 941 (1954).
- [8] E. L. HAHN, Phys. Today 6, 4 (1953).

Ein Computerprogramm zur Berechnung von symmetrisierten, ebenen Wellen

VON B. RENAUD und M. SCHLUETER

(Laboratoire de Physique appliquée, EPF, Lausanne)

Zusammenfassung. Die Berechnung von Elektron-Bändern in Kristallen mit komplexer Struktur erfordert die Diagonalisierung grosser Hamiltonmatrizen. Diese zerfallen nach dem Theorem von Wigner in Blöcke, wenn man symmetrische Ansatzfunktionen verwendet, die sich nach den irreduziblen Darstellungen der Raumgruppe des Kristalls transformieren. In der vorliegenden Arbeit wird ein Fortran IV Computerprogramm beschrieben, das diese Symmetrisierung speziell für ebene Wellen und alle damit verkoppelten Basisfunktionen (APW, OPW) vornimmt. Es verwendet die Projektionsoperatormethode, die als Eingangswerte lediglich die Gruppentransformationen und bestimmte Matrixelemente der irreduziblen Darstellungen erfordert. Das Programm ermöglicht, symmetrisierte, ebene Wellen in beliebiger Anzahl für alle der 230 Raumgruppen zu berechnen.

Einleitung

Will man die Energiebänder und Wellenfunktionen eines Kristalles berechnen, so entwickelt man üblicherweise die Einteilchen-Wellenfunktion nach einem Satz geeigneter Basisfunktionen: $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \sum_{\nu} c_{\nu} f_{\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{k})$. Die Minimalisierung des Gesamt-Energieerwartungswertes führt auf das Eigenwertproblem $\langle f_{\nu} | H - E | f_{\mu} \rangle = 0$. Die Anzahl der nötigen Basisfunktionen und damit der Rang der zu diagonalisierenden Hamiltonmatrix erreicht für Strukturen mit mehreren Atomen in der Einheitszelle Dimensionen, die selbst auf modernen elektronischen Rechnern nur schwer zu handhaben sind.

Beschränkt man sich jedoch auf Zustände $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{k})$, deren \mathbf{k} -Vektoren auf hochsymmetrischen Punkten in der Brillouinzone liegen, dann ist es möglich, die H -Matrix durch Symmetrisierung der Basisfunktionen in nicht-wechselwirkende Blöcke zu faktorisieren. Die Vorteile dieser Zerlegung sind zweifach:

1. Die Rechenzeit, die nötig ist, eine Matrix vom Rang N zu diagonalisieren, wächst mit N^p , wobei $2 < p < 3$ ist. Eine Zerlegung in Blöcke reduziert also die Rechenzeit erheblich.

2. Die Symmetrisierung erlaubt eine Identifikation der Energiebänder, ohne die zugehörigen Wellenfunktionen explizit untersuchen zu müssen. Dies ermöglicht, z. B. Übergangsregeln direkt der Bandstruktur zu entnehmen.

Die Wahl des Typs der Basisfunktionen hängt vom individuellen Problem ab. Die meisten Methoden (PW, APW, OPW, Pseudopotential) benutzen ebene Wellen oder modifizierte ebene Wellen als Basis, da diese bereits die Translationssymmetrie des Kristalls besitzen. Das vorliegende Programm wurde daher speziell zur Symmetrisierung ebener Wellen geschrieben.

Gruppentheoretische Grundlagen

Die Grundlage der Faktorisierung bildet das Theorem von Wigner (1).

$$\langle f_{ij}^{(p)} | H | f_{kl}^{(q)} \rangle = \delta_{pq} \delta_{ik} \langle f_{ij}^{(p)} | H | f_{il}^{(p)} \rangle \mathbf{V}_i. \quad (1)$$

Gegeben sei ein Operator H , der mit allen Gruppenoperationen $R \in G_{\mathbf{k}}$ vertauscht. Das Theorem sagt aus:

1. Alle Matrixelemente zwischen Funktionen, die sich nach verschiedenen irreduziblen Darstellungen $\{p, q\}$ der Gruppe $G_{\mathbf{k}}$ transformieren, verschwinden.
2. In Gruppen $G_{\mathbf{k}}$, die mehrdimensionale Darstellungen besitzen, gibt es keine Matrixelemente zwischen den verschiedenen Basisfunktionen $f_{ij}^{(p)}$ derselben Darstellung. In diesem Fall genügt es, die Matrixelemente für einen einzigen Partner, z. B. $f_{1j}^{(p)}$ in der mehrdimensionalen Basis zu berechnen, da die übrigen Elemente lediglich die Entartung des Eigenwertes reflektieren.

Zur Konstruktion symmetrisierter Basisfunktionen ist die Projektionsoperatormethode [1] wegen ihrer systematischen Anwendbarkeit am besten für Computerrechnungen geeignet.

Gleichung (2) definiert die symmetrie-adaptierte Funktion

$$R \psi_i^{(p)}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = \sum_{j=1}^{n_p} \Gamma_{ji}^{(p)}(R) \psi_j^{(p)}(\mathbf{r}, \mathbf{k}). \quad (2)$$

$\psi_i^{(p)}$ ist der i te Partner in einem Satz von n_p miteinander entarteter Basisfunktionen, die sich nach der n_p -dimensionalen Darstellung $\Gamma^{(p)}$ transformieren. Die Anwendung irgendeiner Gruppenoperation R auf ein $\psi_i^{(p)}$ ergibt eine neue Funktion, die sich im n_p -dimensionalen Raum der $\psi_j^{(p)}$ aufspannen lässt. Die Koeffizientenmatrix ist mit der Darstellungsmatrix $\Gamma_{ii}^{(p)}$ identisch.

Die so definierte symmetrie-adaptierte Funktion lässt sich mittels eines Projektionsoperators erzeugen, wie er in Gleichung 3 definiert ist.

$$\varrho_{ij}^{(p)} = \sum_{R \in G_{\mathbf{k}}} \Gamma_{ij}^{(p)*}(R) \cdot R. \quad (3)$$

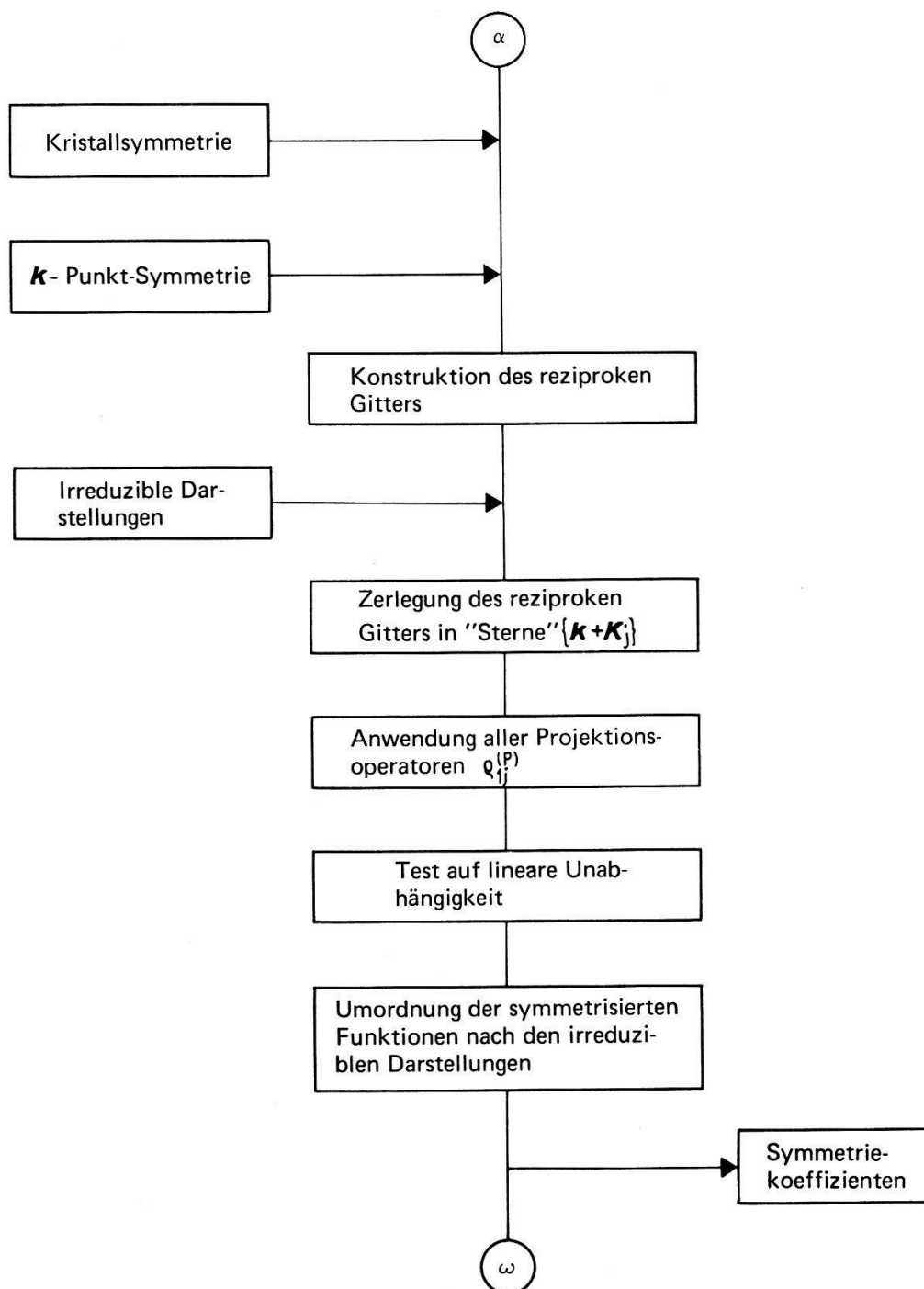
Dieser Operator $\varrho_{ij}^{(p)}$ erzeugt, angewandt auf eine ebene Welle φ , kurz Prototyp genannt, eine Linearkombination von ebenen Wellen $f_{ij}^{(p)}$, die aus dem Prototyp durch Anwendung der Gruppenoperationen R hervorgehen. Die Operationen lassen den Betrag der entsprechenden \mathbf{K} -Vektoren der Wellen invariant; die Menge der so erzeugten Wellen wird «Stern» genannt.

Die Indizes i, j des Projektionsoperators sagen aus, dass im Falle einer n_p -dimensionalen Darstellung im Prinzip n_p verschiedene Basissätze gewonnen werden können,

wobei jeder Satz n_p Basisfunktionen erhält. Es hängt jedoch vom «a priori»-Symmetrieverhalten des betrachteten «Sternes» ab, ob die so gewonnenen Sätze von Funktionen null, linear abhängig oder linear unabhängig sind. Da uns nach dem Theorem von Wigner nur jeweils ein Partner im n_p -dimensionalen Satz von Funktionen interessiert, wählen wir i fest, z. B. $i = 1$.

Programmbeschreibung

Im folgenden soll anhand eines Blockdiagrammes eine kurze Beschreibung des Fortran-IV-Programms gegeben werden, welches die gewünschte Symmetrisierung durchführt (Fig. 1).



Figur 1
Blockdiagramm für Programm CØSYM zur Symmetrisierung ebener Wellen.

Die ersten Eingabedaten bestehen aus:

1. «*Kristall-Symmetrie*». Dies sind:
 - a) die Basisvektoren des reziproken Gitters;
 - b) die Transformationsmatrizen der Kristall-Punktgruppe;
 - c) die nicht-primitiven Translationen im Falle nichtsymmorpher Gruppen.
2. «*K-Punkt-Symmetrie*». Das sind:
 - a) Position des \mathbf{k} -Punktes in der Brillouinzone;
 - b) eine obere Grenze für die \mathbf{K} -Vektoren der ebenen Wellen, die symmetrisiert werden sollen.

Mit diesen Daten werden in Teil I des Programmes alle symmetriebedingten Grössen berechnet. Wichtigster Teil ist die Konstruktion des um den Vektor \mathbf{k} verschobenen, reziproken Gitters.

Anschliessend werden die benötigten Matrix-Elemente der irreduziblen Darstellungen eingelesen. Tabellen dieser Matrizen für alle 230 Raumgruppen sind z. B. in den Büchern von Slater [1] oder Kovalev [2] zu finden.

Teil II des Programmes beginnt mit der Zerlegung des reziproken Gitters in «Sterne», d. h. in Mengen von $(\mathbf{k} + \mathbf{K})$ -Vektoren mit gleicher Länge. Auf jeden dieser «Sterne» wird jeder der Projektionsoperatoren $\rho_{1j}^{(p)}$ angewendet. Die so erzeugten, symmetrisierten Funktionen werden auf lineare Unabhängigkeit getestet, nach den einzelnen irreduziblen Darstellungen geordnet und auf Band geschrieben.

Die Länge des Programms hängt von der Anzahl der zu symmetrisierenden Funktionen ab. Ein Testlauf für etwa 1000 «Sterne» belegte etwa 20 000 Worte Kernspeicher und dauerte auf einer IBM 7040 etwa 20 Minuten.

Literatur

- [1] J. C. SLATER, *Quantum Theory of Molecules and Solids*, Vol. 1, 2 (McGraw Hill 1965).
 [2] O. V. KOVALEV, *Irreducible Representations of the Space Groups* (Gordon and Breach 1965).

Quelques propriétés des monohalogénures d'Indium InBr et InI

par F. LÉVY et E. MOOSER

(Laboratoire de Physique appliquée, EPF, Lausanne, Suisse)

Résumé. La structure des composés InBr et InI est représentée comme une structure intermédiaire entre celle du type NaCl et celle du type CsCl. L'anisotropie des propriétés optiques est en relation avec les chaînes d'ions métalliques dans la direction \mathbf{c} du cristal, qui résultent des liaisons cation-cation formées à partir d'états $5p$ de l'Indium.

Introduction

Parmi les composés isoélectroniques des éléments du groupe V (Sb, SnTe, InI) de nombreux semiconducteurs ont des propriétés structurales et électroniques particulières. L'Indium et le Thallium se présentent à l'état monovalent dans plusieurs

composés. Les halogénures de ces éléments ont des structures cristallines complexes [1] dont les propriétés d'anisotropie sont en rapport avec la nature des liaisons chimiques. La structure des composés InBr et InI est du type TII et constitue un cas intermédiaire entre la structure du type NaCl et celle du type CsCl.

Préparation des cristaux

Il y a deux méthodes de préparation des composés InBr et InI :

1. à partir des éléments chauffés ensemble avec excès du métal ;
2. à partir des composés trivalents d'Indium InBr₃ et InI₃ chauffés avec le métal en excès.

Par la méthode de Bridgman-Stockbarger, on obtient des monocristaux de 10 mm de diamètre. Par évaporation à partir de la phase solide, on prépare des monocristaux de quelques dizaines de microns d'épaisseur et dont les faces sont perpendiculaires à l'axe **b** de la cellule orthorhombique.

Structure cristalline

La structure cristalline orthorhombique de InBr a été déterminée par Stephenson et Mellor [2] et celle de InI, par Jones et Templeton [3]. C'est une structure en couche qui peut être construite de deux manières différentes : par comparaison, d'une part avec la structure du type NaCl, d'autre part avec celle du type CsCl.

I. Couche du type NaCl (Fig. 1)

Une couche du type I est constituée par deux paires de plans d'atomes In et d'atomes I liés l'un à l'autre par la liaison la plus courte anion-cation, parallèle à la direction **b** du réseau. Il y a une liaison courte par paire d'atomes. Chaque atome a quatre voisins un peu plus éloignés dont les liaisons ont aussi été dessinées dans la figure 1 où l'on a représenté la base de la cellule orthorhombique. La couche constitue un arrangement de type NaCl déformé dont le paramètre de la maille *cfc* vaut **a** + **c**. Un empilement régulier des couches du type I forme une structure du type NaCl. On construit la structure des halogénures d'Indium en décalant chaque couche par rapport à l'autre, parallèlement à la direction **a**, sur une distance de $a/2$ (Fig. 3a).

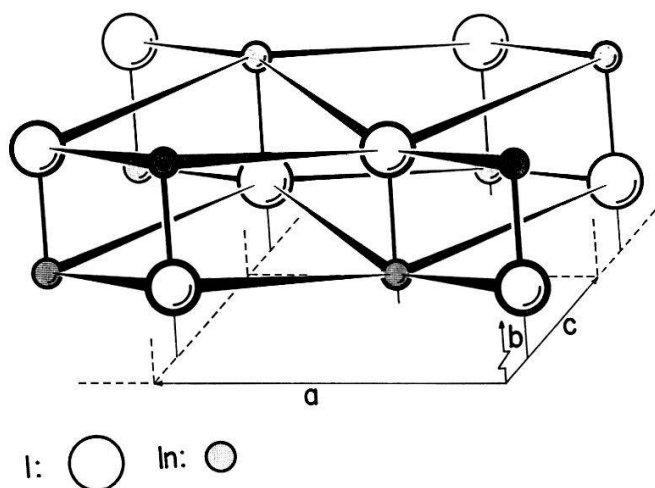


Figure 1
Structure cristalline de InI: décomposition en couches du type I (NaCl déformé). Le paramètre du réseau *cfc* vaut **a** + **c**.

II. Couche du type CsCl (Fig. 2)

La liaison interne d'une couche du type II est la liaison cation-cation, caractéristique de ces composés. Chaque atome métallique est lié à deux atomes semblables et l'angle formé par les deux liaisons vaut 80° pour InBr et 87° pour InI et les distances In-In valent respectivement 3,68 et 3,58 Å. Dans la figure 2, les chaînes d'atomes apparaissent clairement, dans la direction de l'axe *c*. La cellule du type CsCl a aussi été représentée [4]. Un empilement régulier des couches du type II constitue une structure du type CsCl déformé, dont les diagonales de la face perpendiculaire à l'axe *a* de la cellule orthorhombique sont dans un rapport 3:4. On construit la structure du type III en tradant chaque couche par rapport à l'autre dans la direction de *a* et d'une distance de $a/2$ (Fig. 3b).

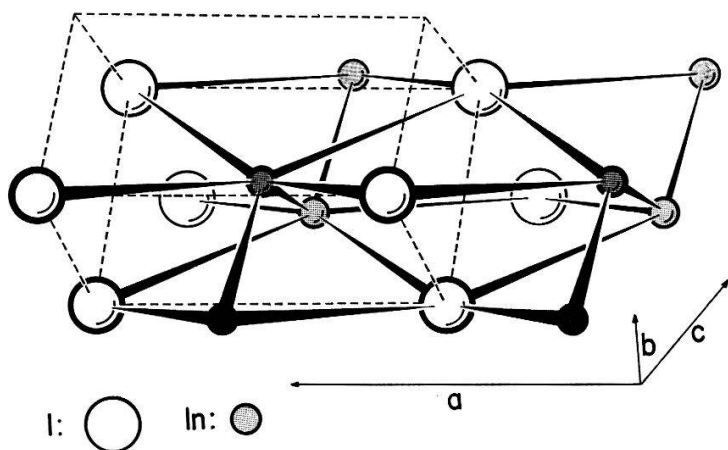


Figure 2
Structure cristalline de InI: décomposition en couches du type II (CsCl déformé). La cellule du type CsCl, représentée en pointillé, est allongée dans la direction *b*.

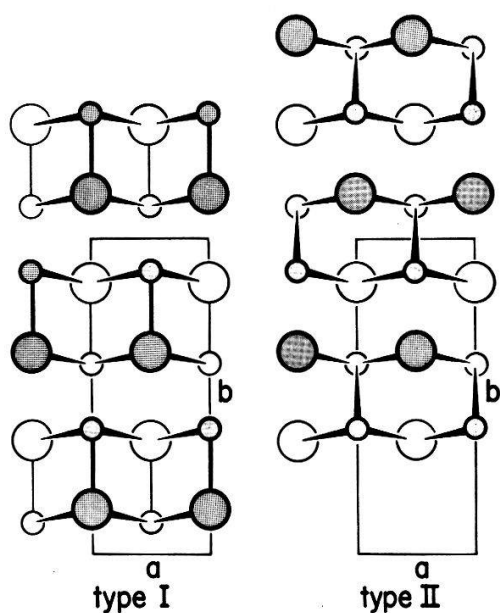


Figure 3

Projection sur un plan (*a b*) de la structure cristalline de InI construite par un empilement des couches du type I (a) et du type II (b).



La structure des monohalogénures d'Indium est ainsi parente, à la fois de la structure du type NaCl et de celle du type CsCl. La même translation des couches les unes par rapport aux autres conduit aux deux types de structure, selon la constitution des couches. Une couche du type I conserve la liaison la plus courte anion-cation, alors qu'une couche de type II conserve la liaison cation-cation. Le nombre de coordination de anions vaut 7 et correspond à une coordination intermédiaire entre celle du NaCl (6) et celle du CsCl (8).

Résultats expérimentaux

La conductibilité électrique de InI a été mesurée par une méthode à quatre points; la valeur de σ est de l'ordre de $10^{-9} \Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$ et la caractéristique courant-tension $J(V)$ est linéaire jusqu'à 40 volt.

L'indice de réfraction a été déterminé à partir des franges d'interférence de la lumière transmise à travers des lames minces, avec une direction de propagation parallèle à l'axe b des cristaux. Pour InBr, l'indice de réfraction est de l'ordre de 5 à 6 pour une vibration parallèle à c et de 3 à 4 pour la direction de polarisation perpendiculaire; sa variation en fonction de la longueur d'onde correspond à une dispersion normale.

Deux seuils d'absorption ont été mis en évidence, à température ambiante, en fonction de la direction de polarisation de la lumière à incidence perpendiculaire aux couches. Les valeurs des arêtes d'absorption sont résumés dans le tableau 1.

Tableau 1
Arêtes d'absorption optique de InI et InBr en eV à température ambiante.

	InBr	InI
$E \parallel C$	2,18	1,96
$E \perp C$	2,31	2,02

Discussion

Les paramètres a et c des cellules orthorhombiques des composés InBr et InI diffèrent de 5,7% et de 3,4% respectivement. La présence des chaînes d'ion In dans la direction c est la cause de l'anisotropie des propriétés de ces cristaux. Le caractère directionnel des liaisons cationiques et l'angle formé par les deux liaisons d'un atome suggère qu'elles sont construites à partir d'états $5p$ de l'Indium. Si deux électrons extérieurs du cation occupent les niveaux liants correspondant aux liaisons entre atomes métalliques, il reste un électron pour contribuer à la liaison avec l'anion d'état $s^2 p^5$. La structure de InBr et de InI est stabilisée par les deux tendances: d'une part celle des cations à former des liaisons cation-cation; d'autre part, la tendance à cristalliser dans une structure avec le nombre de coordination le plus élevé possible qui doit être attribuée au fait que les atomes sont grands, plutôt qu'à un caractère ionique de la liaison.

Nous tenons à remercier M. H. Berger pour la fabrication des monocristaux et nous exprimons notre reconnaissance au Fonds National Suisse de la Recherche Scientifique pour son aide financière.

Références

- [1] J. M. VAN DEN BERG, Acta Cryst. 20, 905 (1966).
- [2] N. C. STEPHENSON et D. P. MELLOR, Austr. J. Sc. Res. A 3, 581 (1950).
- [3] R. E. JONES et D. H. TEMPLETON, Acta Cryst. 8, 847 (1955).
- [4] G. A. SAMARA, Phys. Rev. 165, 959 (1968).

Die elektronische Bandstruktur von hexagonalem GaSe

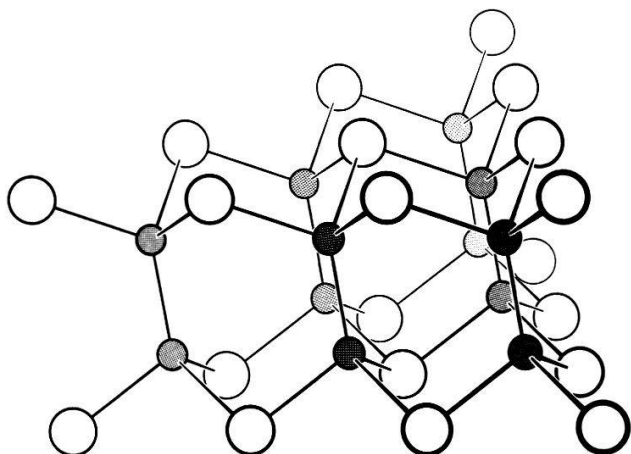
von M. SCHLUETER

(Laboratoire de Physique appliquée, EPF, Lausanne)

Zusammenfassung. Die Energiebänder von β -GaSe wurden in der Pseudopotentialnäherung berechnet. Die sphärisch-symmetrischen, lokalen Pseudopotentiale für Se und Ga wurden empirisch durch Anpassung eines direkten und indirekten optischen Gaps an experimentelle Daten bestimmt. Die dreidimensionale Bandstruktur zeigt gute Übereinstimmung mit früheren zweidimensionalen Rechnungen von Bassani, die Leitungsbänder ausgenommen. Im Gegensatz zu diesen früheren Ergebnissen vermag die vorliegende Arbeit die experimentell gefundenen optischen Übergänge richtig zu beschreiben. Schliesslich gestatten die dreidimensionalen Rechnungen, die Wechselwirkung der einzelnen Schichten untereinander und damit die Anisotropie der Bänder abzuschätzen.

Einleitung

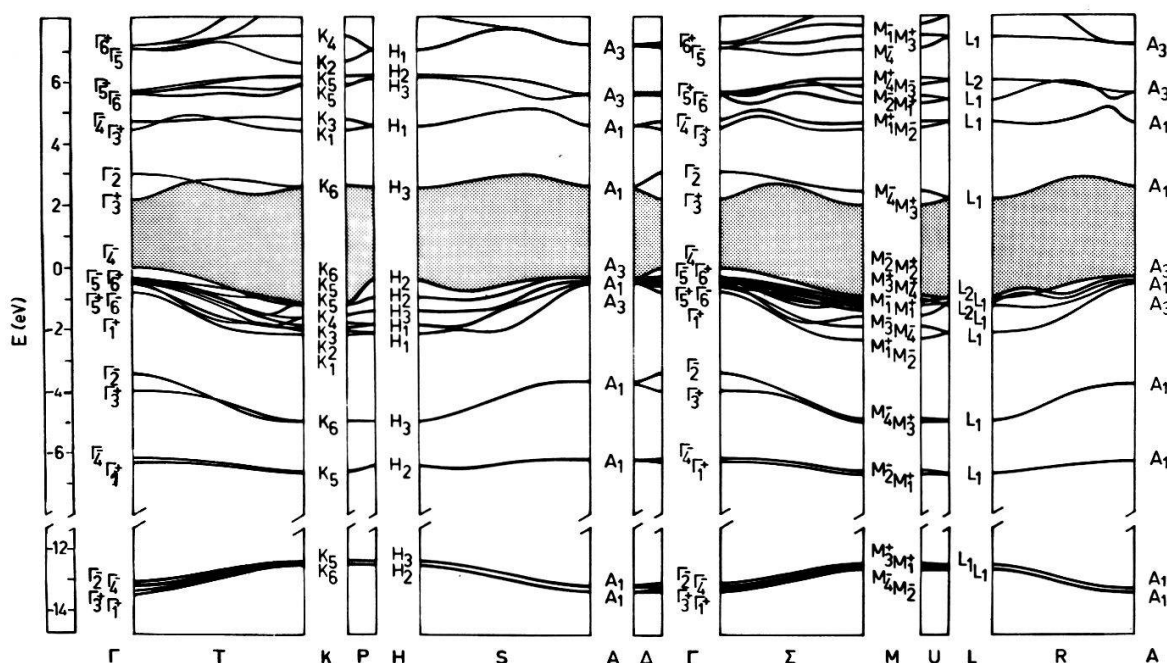
Die III-VI Halbleiter GaSe und GaS kristallisieren in stark anisotroper Schichtstruktur [1]. Jede Schicht umfasst 4 dichtgepackte Atomebenen in der Reihenfolge Anion-Ga-Ga-Anion (Fig. 1). Auf Grund der starken covalenten Bindung innerhalb der Schichten und der schwachen van der Waals-Bindung zwischen den Schichten, kann in erster Näherung die Wechselwirkung zwischen den Schichten vernachlässigt werden. Bassani et al. [2] und Kamimura et al. [3] haben so zweidimensionale Bandstrukturen mittels der «tight-binding»-Methode berechnet. Obwohl diese Berechnungen eine generelle Übersicht über die Bänderstruktur geben, können sie die optischen Absorptions-Messungen nicht zufriedenstellend erklären. Der Grund hierfür ist die schlechte Wiedergabe der Leitungsbänder im «tight-binding»-Schema. Die Stärke der Schicht-Schicht-Bindung kann in dieser Näherung selbstverständlich nicht abgeschätzt werden. Diese Nachteile waren Anlass zu vorliegender Arbeit, in der dreidimensionale Energiebänder mit der Pseudopotential-Methode berechnet werden. Wir haben zu diesem Zweck eine Elementarzelle zu wählen, die sich über zwei Schichten erstreckt und somit 8 Atome mit 36 Elektronen enthält. Um den rechnerischen Aufwand möglichst niedrig zu halten, beschränken wir uns auf lokale, kugelsymmetrische Pseudopotentiale, die empirisch variiert werden, um die Bandstruktur an optische Messungen, dies ist ein direktes und indirektes Gap, anzupassen [4], [5]. Allerdings beschreibt dieser simple Potentialansatz nur grob die van der Waals-Kräfte zwischen den Schichten. Einzig der relativ grosse Schichtabstand, der eine kleine Überlappung der Atompotentiale zur Folge hat, trägt der schwachen Wechselwirkung Rechnung.



Figur 1
Teil einer GaSe-Schicht.

Die Bandstruktur

Figur 2 zeigt die Bandstruktur von GaSe längs der hochsymmetrischen Richtungen in der hexagonalen Brillouinzone. Die vier am tiefsten liegenden Bänder entsprechen nichtbindenden Se-s-Zuständen. Die bindenden Zustände der Ga-Ga-Bindung enthalten das höchste besetzte Valenzband; sie überlappen mit den bindenden Zuständen der Ga-Se-Bindung. Das erste Leitungsbandpaar wird durch die antibindenden Zustände der Ga-Ga-Bindung gebildet. Das optische Gap liegt also zwischen bindenden und antibindenden Zuständen der Ga-Ga-Bindung. Dieser Umstand ist für die stark anisotropen Übergangsregeln verantwortlich. Gruppentheoretische Überlegungen zeigen, dass alle Zustände mit k -Vektoren, die auf der Grundfläche der Brillouinzone liegen, wegen Zeitumkehr mindestens zweifach entartet sind. In den



Figur 2
Bandstruktur von GaSe längs einiger Symmetrierichtungen in der hexagonalen Brillouinzone. Die Bandsymmetrien sind durch die irreduziblen Darstellungen der Gruppe D_{6h}^4 gekennzeichnet.

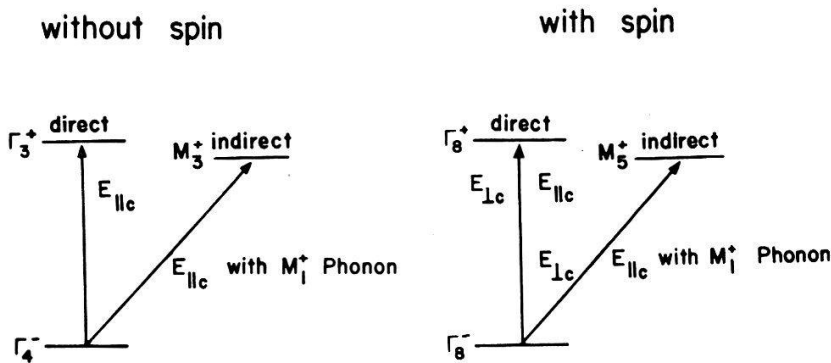
übrigen k -Punkten ist diese Entartung durch die Schicht-Schicht-Wechselwirkung teilweise aufgehoben. Es erscheinen Paare von Bändern mit einer Aufspaltung, die zwischen 0,1 eV und 0,8 eV variiert. Die Bandweite der Bänder in z -Richtung, gemittelt über alle besetzten Valenzzustände, beträgt 120 meV und ist ein Mass für die Schicht-Schicht-Wechselwirkung. Dieser Wert ist vergleichbar mit einem experimentellen Wert von 50 meV, gemessen als Differenzenergie der optischen Gaps für zwei verschiedene (ϵ - und β -)Modifikationen von GaSe [8].

Tabelle 1 zeigt effektive Massen für Elektronen und Löcher bei $k = 0$. Die Massen $m_{\parallel c}$ erscheinen zu leicht, verglichen mit den Werten für $m_{\perp c}$. Diese Tatsache ist eine Folge der ungenügenden Beschreibung der Schicht-Schicht-Wechselwirkung durch kugelsymmetrische Pseudopotentiale.

Tabelle 1
Berechnete effektive und reduzierte Massen parallel und senkrecht zur Kristallachse c .

	$m_{\parallel c}$	$m_{\perp c}$	$\mu_{\parallel c}$	$\mu_{\perp c}$
V	-0,25	-1,05	0,12	0,38
C	0,25	0,6		exp. 0,15 [9]

Die Auswahlregeln für optische Dipolübergänge sind in Figur 3 zu sehen. Sowohl Valenz- als auch Leitungsband sind nicht entartet. Ihre Symmetrien erlauben Übergänge für $E_{\parallel c}$. Durch Spin-Orbit-Wechselwirkung jedoch werden Übergänge für $E_{\perp c}$ schwach erlaubt. Ferner liegen einige experimentelle Hinweise für die Existenz eines indirekten Gaps, ungefähr 50 meV unter dem direkten Gap, vor. Wir ordnen es dem Übergang $\Gamma_4^- \rightarrow M_3^+$ zu, wobei M_3^+ ebenfalls nicht entartet ist [4]. Alle diese Zuordnungen erklären die optischen Messungen an der Bandkante, die Exzitonen-Experimente eingeschlossen [4]–[7].



Figur 3
Auswahlregeln für optische Dipolübergänge in GaSe.

Zusammenfassung

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass die in Pseudopotential-Näherung berechnete Bandstruktur die optischen Messungen in der Nähe der Absorptionskante gut wiedergibt. Insbesondere Polarisierungseffekte können erklärt werden.

Die berechneten effektiven Massen zeigen keine ausgeprägte Anisotropie. Die Werte für $m_{\parallel c}$ sind zu klein, was eine Folge der mangelhaften Beschreibung der schwachen van der Waals-Kräfte zwischen den Schichten durch die benutzten, kugelsymmetrischen Pseudopotentiale ist. Durch Hinzunahme von Korrekturtermen zum Potential können die Werte für $m_{\parallel c}$ verbessert werden.

Literatur

- [1] F. JELLINEK et al., *Z. Naturforsch.* *16 b*, 713 (1961).
- [2] F. BASSANI et al., *Nuovo Cim. B* *50*, 95 (1967).
- [3] H. KAMIMURA et al., *J. Phys. Soc. Japan* *24*, 1313 (1968).
- [4] E. MOOSER et al., *Phys. Stat. Sol.* *31*, 129 (1969).
- [5] J. BREBNER, *J. Phys. Chem. Solids* *25*, 1427 (1964).
- [6] F. BASSANI et al., in *Proc. Intern. Conf. Physics Semicond.*, Paris 1964, p. 51.
- [7] E. MOOSER, *Helv. phys. Acta* *40*, 382 (1967).
- [8] J. BREBNER et al., *Phys. Lett.* *24 A*, 274 (1967).
- [9] L. FRITSCHÉ, *Phys. Stat. Sol.* *34*, 195 (1969).

Autres communications (Physique appliquée) voir *Z. angew. Math. Phys.* *23*, 160 (1972).