

Az Nd helyére a következőt írhatjuk:

$$Nd = \frac{m}{M} N_A \frac{1}{V} d = \frac{N_A}{M} \rho d,$$

ahol m a tömeg, M a moláris tömeg, N_A az Avogadro-szám, V a térfogat, ρ a sűrűség, ρd pedig nem más, mint a vastagság tömeg/felszín dimenzióban. Ezt a (7)-be helyettesítve kapjuk:

$$\frac{\rho_{\text{CH}_2} d_e}{M_{\text{CH}_2}} \sigma_{\beta, \text{CH}_2} = \frac{\rho_T \delta}{M_T} \sigma_{\beta, T},$$

átrendezve:

$$\sigma_{\beta, T} = \frac{\rho_{\text{CH}_2} d_e}{\rho_T \delta} \frac{M_T}{M_{\text{CH}_2}} \sigma_{\beta, \text{CH}_2}. \quad (8)$$

Ha a minta keverékanyagból áll, a moláris tömeget a következő átlagként számíthatjuk:

$$\langle M \rangle = \frac{\sum_i m_i}{\sum_i \frac{m_i}{M_i}}, \quad (9)$$

ahol m_i és M_i rendre a keveréket alkotó i típusú atomok össztömege és moláris tömege. Keverékanyag esetén a neutron-visszaszórási hatáskeresztmetszet a következő módon áll elő:

$$\langle \sigma_{\beta} \rangle = \frac{\sum_i n_i \sigma_{\beta_i}}{\sum_i n_i}, \quad (10)$$

ahol n_i és σ_{β_i} rendre a keverékben levő i típusú atomok száma és reflexiós hatáskeresztmetszete.

A fenti módszer alkalmas arra, hogy az ekvivalens vastagság meghatározásával és a (8) felhasználásával az adott mintát alkotó atomok vagy molekulák neutron-visszaszórási hatáskeresztmetszetét relatív módon határozzuk meg,

ahol a polietilénre vonatkozó $\sigma_{\beta, \text{CH}_2} = 37,6 \pm 1,0$ barn értéket használva referenciaként.

A reflexiós hatáskeresztmetszetek ismeretében bármely X elemre vagy vegyületre mint referenciára vonatkozó $d_{e,X}$ ekvivalens vastagság kiszámítható. Ehhez tekintsük a (8) jobb oldalán álló kifejezésben a polietilénre mint referenciára vonatkozó mennyiségeket. Helyettesítsük ezeket az X elemre vagy vegyületre mint referenciára érvényes adatokkal úgy, hogy a jobb oldal értéke ne változzék:

$$\frac{\rho_{\text{CH}_2} d_{e, \text{CH}_2}}{M_{\text{CH}_2}} \sigma_{\beta, \text{CH}_2} = \frac{\rho_X \delta_{e,X}}{M_X} \sigma_{\beta, X}.$$

Ebből átrendezéssel a következőt kapjuk:

$$\rho_X d_{e,X} = \frac{M_X}{M_{\text{CH}_2}} \frac{\sigma_{\beta, \text{CH}_2}}{\sigma_{\beta, X}} \rho_{\text{CH}_2} d_{e, \text{CH}_2}. \quad (11)$$

Ha például a δ vastagságú mintába vezet teszünk referenciaanyagként ($X = \text{H}_2\text{O}$), akkor a (11) egyenlőség adja meg a víz és a már ismert, polietilénre vonatkozó ekvivalens vastagság közötti összefüggést. Ez főként akkor lehet hasznos, ha nem akarjuk, hogy a mintánk vízzel érintkezzen, mégis szükségünk lenne elemzéshez a kalibrációs egyenes felvételére. A tiszta mintára vonatkozó többletbeütés (R_T) és a víznek mint referenciának ekvivalens vastagsága elegendő az egyenes meghatározásához.

Köszönetnyilvánítás

Köszönetet tartozom és 75. születésnapja alkalmával további jó egészséget kívánok *Csikai Gyula* professzornak, akinek vezetésével a Debreceni Egyetem Kísérleti Fizikai Tanszékén a doktori értekezésemet készítettem 1999 és 2003 között [3]. Jelen cikkben ennek egyik témáját ismertettem röviden.

Irodalom

1. J. CSIKAI, CS.M. BUCZKÓ: *The concept of the reflection cross section of thermal neutrons* – Applied Radiation and Isotopes 50 (1999) 487–490
2. E. AMALDI, E. FERMI: *On the absorption and the diffusion of slow neutrons* – Physical Review 50 (1936) 899–928
3. KIRÁLY B.: *Kiterjedt közegek analitikai vizsgálata neutronokkal* – Doktori (PhD) értekezés, Debreceni Egyetem, Természettudományi kar, Debrecen, 2003

MÁGNESES SZERKEZETEK ÉS FÁZISÁTALAKULÁSOK VIZSGÁLATA NEUTRONDIFFRAKCIÓVAL

Kádár György, MTA Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Kutatóintézet
Krén Emil, KFKI Számítástechnikai Rt.

Bizonyára sokan egyetértéssel fogadnák azt a kijelentést, hogy a KFKI-ban a szilárdtestfizika professzionális művelése az 1960-as években különleges lendületet kapott. A vizsgált kondenzált anyagok akkoriban elsősorban a kristályos szerkezetű szilárdtestek, azon belül is a mágneses

*Pál Lénárd*nak ajánlva 80-ik születésnapjára.

tulajdonságaik miatt érdekes anyagok voltak. A vizsgálati módszerek tekintetében kiemelt szerepet kaptak a nukleáris kísérleti módszerek, a Mössbauer-effektus, a nukleáris mágneses rezonancia és a neutronszórás, kiegészítve a klasszikusnak számító röntgendiffrakcióval és a makroszkopikus mágneses paraméterek mérésével. Fejlettebb nyugati laboratóriumokat is megjárta fiatal munkatársak a

mágneses anyagok kutatására szakosodva határozott koncepció szerint megszervezett keretben tevékenykedtek például a *Mágneses szerkezetek és fázisátalakulások* címmel jelzett programon. Erős technológiai csoport gondoskodott a vizsgálatra szánt, kívánt összetételű anyagminták készítéséről és elsődleges minősítéséről. A szakterület elméleti eredményeinek megismerését és gyarapítását kiváló elméleti fizikusok művelték. *Pál Lénárd* heti szemináriumain előadást tartani megtisztelő kötelességnek számított a szilárdtestfizikusok közé tartozni akaró ifjú kutatók számára.

Képkalkotás, szerkezetkutatás

Az anyagok atomi léptékű szerkezetének kutatása kétségkívül fontos tudományos szakterület. Bármilyen fizikai jelenségnek vagy folyamatnak a vizsgálata során felmerülő „hogyan és miért” kérdések megválaszolását célszerű úgy elkezdni, hogy előbb igyekszünk tisztázni az anyaghoz kapcsolódó „milyen, miből és hogyan épül fel, milyen a szerkezete” kérdéseket. Az anyagi közeget meg akarjuk nézni, látni akarjuk a formáját, képet akarunk róla alkotni.

A képkalkotási módszerek elvileg két, nagyjából elkülöníthető csoportba tartoznak: részecskeszerű és hullámszerű „eszközökkel” hozhatunk létre képmást egy tárgyról.

A részecskeszerű képkalkotási módszerek legkorábbi nyilvánvaló formája a *Laterna Magica*, amelyben egy tűszerű lyukon keresztül a külvilág minden irányából egy-egy határozott színű és intenzitású vékony fénysugár érkezik a pergameneryőre, azon kirajzolva a környező tárgyak fordított képét. Ugyanilyen alapelv szerint működik néhány korszerű tapogató vagy pásztázó eszköz, például az elektronmikroszkópia vagy az alagútmikroszkópia területén. Nyilvánvaló, hogy a képkalkotás felbontóképességét, az egymástól megkülönböztethető képpontok méretét a pásztázó nyaláb (tűlyuk, elektronnyaláb, tapogató tűhegy) mérete határozza meg.

A hullámszerű képkalkotás közvettebb módon történik, amit a látásunk példájával mutathatunk be. A tárgyakra egy fényforrás, például a Nap fényének kiterjedt hullámnyalábjába esik, azon a fizikai optika törvényei szerint szóródik, és a szóródással létrejött hullámtérből a szemünk lencséje hozza létre a képet és vetíti a retina síkjára. A szóráselmélet szerint a hullámok szóródása és interferenciája során a tárgyak Fourier-transzformált hullámtere jön létre, amelyből a szemlencse egy másik Fourier-transzformációval állítja elő a szemünkkel látható képet. Ugyanez megtörténik a fényképezőgépekben, mikroszkópokban, távcsövekben, a klasszikus optikai eszközökben is. A fény ugyanis alkalmas fénytörő közegből készült Fourier-transzformátor eszközzel, a lencsével irányítható, párhuzamos síkhullámból fókuszált gömbhullámmá, egy pontból induló gömbhullámból párhuzamos síkhullámmá formálható az elektromágneses sugárzás látható hullámhossztartományában. A fénytörés jelensége, a fény klasszikusan folytonos terelhetősége összefügg azzal, hogy egyetlen hullámhossznyi távolságú terjedés során a fény sok ezer atomi részecskével kerül köl-

csönhatásba, a kvantumfizikai hatások összege klasszikusan leírható jelenséget eredményez. Itt a képkalkotás felbontóképességét a hullámnyaláb hullámhossza határozza: minél közelebbi képpontokat kívánunk megkülönböztetni, annál kisebb hullámhosszú nyalábot kell alkalmaznunk.

Az anyagok atomi léptékű szerkezetének meghatározása tehát világos feladat, az atomi méreteknél és távolságoknál finomabb képi felbontóképesség eléréséhez 0,1 nanométer vagy annál kisebb méretű tapogató nyalábra, tűhegyre vagy ilyen hullámhosszú sugárnyalábra van szükség. A pásztázó szondás „részecskeszerű” felületvizsgáló eszközökben (alagútmikroszkóp, atomerő-mikroszkóp stb.) az atomi felbontás ma már szinte rutinszerűen elérhető. A kiterjedt hullámszerű elektronnyalábbal, elektromágneses „lencsével” működő korszerű transzmissziós (átvilágító) elektronmikroszkópokban is megkülönböztethetőek a különálló atomok. Ez utóbbi módszereknek közös hátránya, hogy a tapogató szonda csak a vizsgált anyagminta felületéről, a töltött elektronok pedig csak néhány atomnyi vastagságú felületi rétegről tudnak képet alkotni. Nagyobb áthatolóképességű, semleges töltésállapotú hullámnyalábokra lenne szükség.

A röntgensugárzás és a termikus neutronok hullámhossza megfelel az atomi léptékű felbontóképesség követelményének, és az anyagokban sokkal kevésbé nyelődnek el, mint az elektronok. Ez a kétféle sugárzás lehetne tehát az atomi felbontású képkalkotás legcélszerűbb eszköze. Az anyag atomi részecskéin való szóródás és interferencia útján létrehozzák az anyagi testet jellemző Fourier-transzformált hullámteret, amelyet most már „csak” vissza kell transzformálni a képmás előállítás céljából. És éppen ez itt a bökkenő. Ilyen rövid, atomi távolságnyi hullámhosszú sugárzások nem terelhetők a látható fény módjára, még nem találták fel és valósították meg a rájuk alkalmazható Fourier-transzformátor szerepét betöltő lencsét. Direkt képkalkotásra tehát nincs mód. Meg kell elégednünk azzal, hogy a hullámoknak az anyagokon való interferenciaszóródása során az anyag atomi léptékű szerkezetére vonatkozó Fourier-transzformált hullámtér keletkezik, amelyet eszközként lehet felhasználnunk a szerkezet lehető legteljesebb megismerése céljából. Ez utóbbi mondat meg is fogalmazta a diffrakációs szerkezetvizsgáló módszerek lényegét: a vizsgált anyagmintán szóródott hullámteret kell mérésrel feltérképeznünk, és abból kiszámítanunk az atomi léptékű szerkezetet. Komoly és elkerülhetetlen veszteséget jelent az a körülmény, hogy a szórt hullámtérnek csak az intenzitását tudjuk megmérni, a hullámok fázisa a mérés során elvesz, ismeretlen marad. A diffrakációs szerkezetvizsgálat tehát természeténél fogva közvetett, csak egyik irányban egyértelmű módszer: ismert szerkezet egyértelmű diffrakációs képet ad, de egy adott diffrakációs kép többféle szerkezetből is származhat. Ilyenféle tökéletlenségek ellenére a diffrakációs szerkezetvizsgálattal az elmúlt majdnem száz év során a szilárd halmazállapotú elemek, vegyületek, ötvözetek szinte teljes körének kristályszerkezetét sikerült meghatározni. A diffrakációs szerkezetkutatás nehézségeit, buktatóit és intellektuális szépségeit kitűnően szemlélteti *James D. Watson* Nobel-díjas biológus, bioké-

mikus 1968-ban megjelent *The double helix* (A kettős spirál) című könyve, amelyben leírja azt a gyönyörűséges szellemi pokoljárását, amelynek a végén 1953-ban a *Nature* folyóiratban megjelenhetett az örökléstan alapmolekulája, a DNS (deoxiribonukleinsav) szerkezetét leíró levél [1] Crick és Watson tollából.

A továbbiakban a KFKI kísérleti atomreaktora mellett folyó neutrondiffrakciós kutatásokra, az atomi léptékű mágneses szerkezet meghatározásának módszerére és néhány hazai eredményre fordítjuk a figyelmünket.

Neutrondiffrakció

A neutronnyalábok hullámszerű terjedésének és kristályos anyagokon való interferenciaszóródásának kísérleti bizonyítéka 1936 óta ismert. A neutrondiffrakció módszere az ötvenes évek elején indult fejlődésnek a nukleáris reaktorok elterjedésével egyidejűleg, mivel ezek elég nagy intenzitású neutronnyalábokat tudtak már szolgáltatni az ilyen kísérletekhez.

A neutronok a szilárd anyagokkal kétféle „szerepben” lépnek kölcsönhatásba: egyrészt mint nukleonok a magerők miatt szóródnak a kristályt felépítő atomok magjain, másrészt mint perdülettel, tehát mágneses momentummal rendelkező részecskék a mágneses dipól–dipól kölcsönhatás következtében szóródnak az atomok elektronjain. A nukleáris szórás rugalmas diffrakció esetén lényegében a röntgendiffrakcióval azonos adatokat ad a kristály atomi felépítéséről, ezért a kristályszerkezet meghatározására – speciális alkalmazási esetektől eltekintve – általában célszerűbb a jóval nagyobb hagyományú, olcsóbb és kevésbé időigényes röntgendiffrakciót alkalmazni.

A neutrondiffrakció legkézenfekvőbb alkalmazási területe éppen abból adódik, hogy a neutron az anyagok belsejében levő, helyről helyre változó *mágneses tér* érzékelésére is alkalmas. 1949-ben jelent meg az első olyan közlemény, *C.B. Shull* és *J.S. Smart* munkája, amelyben egy szilárd anyag (MnO) mágneses szerkezetét határozták meg neutrondiffrakcióval [2]. A neutrondiffrakció módszere az anyagok mágneses szerkezetének, azaz a mágneses momentumok atomi léptékű, periodikus térbeli elrendeződésének tanulmányozására azóta is a legkövetlenebb és lényegében az egyetlen módszer.

A neutronnyaláb anyagon való szóródását a kvantummechanika matematikai eszközeivel írjuk le. A neutronok hullámfüggvényének a kölcsönhatási potenciál hatására történő időbeli változását a részecskeáram fogalmának alkalmazásával térbeli függvényekre vezetjük vissza. A tényleges kísérletekben valóban a neutronok folytonos árama esik a vizsgált anyagmintára, és a szórt neutronok térbeli eloszlását figyeljük meg.

A részecskeáram kifejezésében a neutronok térkoordinátáktól függő hullámfüggvénye adott impulzusú beeső nyaláb esetén egy síkhullám, a minta valamely pontjából szóródott részecskék esetén pedig az adott pontból kiinduló gömbhullám, amelynek erősségét a kölcsönhatási potenciálból származtatott mennyiség, a *szórási amplitúdó* vagy szórási tényező határozza meg. Egy összetett anyagmintáról szóródott hullámtér az összetevő atomok-

ról szóródott hullámok szuperpozíciójával, azaz fázis szerinti összegzésével állítandó elő. Az összetett minta szórási amplitúdója tehát egyaránt tartalmazza a minta egyes atomjainak a potenciálfüggvényére és az atomok egymáshoz viszonyított helyzetére vonatkozó információit. A szórási tényező négyzetét, amely arányos a szórdott részecskeáram mért intenzitásával, differenciális *szórási hatáskeresztmetszetnek* nevezzük.

A következőkben ismertetjük azokat az alapvető összefüggéseket, amelyek a neutrondiffrakciós kísérleti módszer megértéséhez szükségesek. Bocsássunk m_0 tömegű, \mathbf{k} hullámvektorú, σ spinváltozókkal jellemzett neutronokból álló nyalábot az α általánosított paraméterrel összefoglalt kvantummechanikai állapotú kristályra! A szórási folyamatban a neutronok hullámvektora \mathbf{k}' -re, spinváltozójuk σ' -re változik, a kristály az α' állapotba kerül. A neutronok beeső hullámvektorát adottnak, a szórt hullámvektort a mérésel meghatározottnak, a neutronnyalábok spinállapotát és a kristály kvantummechanikai állapotát lényegében ismeretlennek, csak statisztikusan meghatározottnak tekintjük. A neutron és a kristály atomi részecskéi közötti kölcsönhatást a helyről helyre változó értékű $V(\mathbf{R})$ potenciál írja le.

Ha ez a kölcsönhatási potenciál elég kicsi ahhoz, hogy a neutronok E_k kinetikus energiája és a kristály E_α energiája mellett a Hamilton-operátorban perturbációként legyen kezelhető, akkor a *Born-közelítés* [3] szerint a következő képlet írja le a szórás differenciális hatáskeresztmetszetét, amely a mérhető szórt intenzitással arányos mennyiség:

$$I \propto \frac{d^2 \sigma}{d\Omega dE'} = \frac{k'}{k} \frac{m_0}{2\pi \hbar^2} \cdot \sum_{\substack{\alpha', s' \\ \alpha, s}} p_\alpha p_s |\langle k', \alpha', s' | V(\mathbf{R}) | k, \alpha, s \rangle|^2 \delta(\Delta E_k + \Delta E_\alpha), \quad (1)$$

ahol az egyes, határozott paraméterekkel jellemezhető folyamatok hatáskeresztmetszeteit átlagolnunk kell a lehetséges kezdeti állapotokra, és összegezni a lehetséges végső állapotokra nézve. A kristály és a neutronspin kezdeti és végső kvantummechanikai állapotát nem kell szükségképpen ismernünk, az átlagoláshoz elegendő az α kezdeti kristályállapot p_α valószínűségét, és az s kezdeti neutronspin-állapot p_s valószínűségét megadni. A $\delta(\Delta E_k + \Delta E_\alpha)$ Dirac-féle delta-függvény az energiamegmaradás törvényét fejezi ki:

$$\Delta E_k = \hbar^2 \frac{k'^2 - k^2}{2m_0}$$

a neutron kinetikus energiájának, ΔE_α pedig a kristály energiájának a megváltozása a szórási folyamatban. (Amennyit az egyik lead, annyit vesz fel a másik, tehát előjelük mindig ellentétes.)

Egy kristályos anyag atomi és mágneses szerkezetét akkor tekinthetjük ismertnek, ha a periodikus kristályrács egyetlen elemi cellájában ismerjük az atomok pozícióját, és ha meg tudjuk mondani, hogy azon a helyen milyen atom és annak mekkora mágneses momentum van. Egy ilyen elemi cellából felépíthetjük a kristályrács tökélete-

sen periodikus, rácshibáktól mentes és időben változatlan ideális modelljét.

A reális kristály kölcsönhatási potenciáljából átlagolással elkülöníthetjük egymástól az ideális homogén modellt és a zavaró térbeli és időbeli inhomogenitásokat:

$$V(\mathbf{R}) = \overline{V(\mathbf{R})} + \Delta V(\mathbf{R}), \quad (2)$$

$$\overline{V(\mathbf{R})} = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \langle \alpha | V(\mathbf{R}) | \alpha \rangle. \quad (3)$$

A $\overline{V(\mathbf{R})}$ átlagpotenciált a valódi kristály tulajdonságait hordozó összes lehetséges kvantummechanikai állapotok átlagaként állítottuk elő [4]. Ez a mennyiség az $|\alpha\rangle$ kristályállapotokra nézve már nem operátor, hanem a térben és időben kiátlagolt tulajdonságú kristályra jellemző függvény, amely csak a térkoordinátáktól függ, és a kristály periodicitásának megfelelően egyenletesen periodikus. Így definíció szerint: $\overline{V(\mathbf{R})} \equiv 0$.

Diffракció alatt éppen az átlagolt ideális modelltől adódó rugalmas, koherens neutronszórást értjük, ezért a továbbiakban a hatáskeresztmetszet (1) képletében csak az átlagpotenciálból származó járulékot vizsgáljuk:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} = \left(\frac{m_0}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \sum_{s,s'} p_s \left| \langle k', s' | \overline{V(\mathbf{R})} | k, s \rangle \right|^2 \delta(\Delta E_k). \quad (4)$$

Az elhagyott $\Delta V(\mathbf{R})$ -t tartalmazó tag az átlagpotenciáltól való eltéréseket venné figyelembe, amelyek inkoherens és rugalmatlan szórással csak a diffrakciós mérés zavaró háttérsugárzását növelnék.

Megjegyezzük itt, hogy a kondenzált anyagok dinamikus elemi gerjesztéseinek tanulmányozására a rugalmatlan neutronszórás elsődű fontosságú kísérleti módszer. A reaktorokból kapható termikus neutronok 0,1 nm körüli hullámhossza és 0,025 eV körüli energiája éppen a kollektív gerjesztések (fononok, magnonok stb.) hullámhossz- és energiátartományával azonos nagyságrendbe esik, így az energia- és impulzuscsere a rugalmatlan szórás folyamatban egyazon kísérleten belül tanulmányozható. A szilárdtestek vizsgálatára alkalmas egyéb sugárzások (fény, röntgen, elektron stb.) esetén általában nincs ilyen szerencsés egybeesés a szóba jövő hullámhosszak és energiák között.

Bragg-reflexiók

A továbbiakban tehát csak a rugalmas, koherens szórás hatáskeresztmetszetére lesz szükségünk. A kristály állapotainak az előzőekben leírt általános és absztrakt jellegű tárgyalásához képest a neutronok hullámfüggvénye már sokkal konkrétabban kezelhető. A \mathbf{k} hullámvektorú nyáláb neutronjainak a hullámfüggvényében a koordinátáktól függő rész periodikus $\exp(i\mathbf{K}\mathbf{R})$ alakú síkhullám. Ezt a hatáskeresztmetszet képletébe helyettesítve kapjuk:

$$I(\Omega) \propto \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{koherens}}^{\text{rugalmas}} = \left(\frac{m_0}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \sum_{s,s'} p_s \left| \int d\mathbf{R} \langle s' | \overline{V(\mathbf{R})} | s \rangle \exp(i\mathbf{K}\mathbf{R}) \right|^2, \quad (5)$$

ahol $\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ a szórási vektor, amelyben a beeső és a szórt neutronok hullámvektorai csak irány szerint különböznek egymástól, mindkettőnek a nagysága a λ hullámhossz reciprokával arányos:

$$|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'| = \frac{2\pi}{\lambda}.$$

A diffrakciós intenzitás tehát elvileg tartalmazza az ideális kristály és a neutronok $\overline{V(\mathbf{R})}$ kölcsönhatási potenciáljának Fourier-transzformált függvényét. A kristályrács ideális modellszerű periodikus szerkezete az $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ elemi rácsállandó-vektorokkal kifeszített, egymással azonos elemi cellákból épül fel, így elegendő megadni egyetlen cellában a különböző atomi pozíciót meghatározó paraméterekkel jellemzett pontokban található, egyforma atomok neutronszórási paramétereit. Az atomok koordinátáit az adott elemi cella origójába mutató $\mathbf{T}_m = t_1\mathbf{a}_1 + t_2\mathbf{a}_2 + t_3\mathbf{a}_3$ translációs vektor és az elemi cella origójából mért $\mathbf{r}_i = x_i\mathbf{a}_1 + y_i\mathbf{a}_2 + z_i\mathbf{a}_3$ atomi pozícióvektor összegeként írjuk fel: $\mathbf{R}_{im} = \mathbf{T}_m + \mathbf{r}_i$. Ekkor az integrálás a kristály atomjaira való összegzéssel helyettesíthető:

$$\frac{m_0}{2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{R} \overline{V(\mathbf{R})} \exp(i\mathbf{K}\mathbf{R}) = \quad (6)$$

$$\sum_{i,m} U_{im} \exp(i\mathbf{K}\mathbf{R}) = \sum_i \exp(i\mathbf{K}\mathbf{r}_i) \sum_m \exp(i\mathbf{K}\mathbf{T}_m),$$

ahol $U_{im} = U_i$ a neutronnak az elemi cella atomjaival való kölcsönhatását írja le. Az m -re vonatkozó összegzés az egész kristály minden elemi celláján, az i -re vonatkozó összegzés pedig csak az egy elemi cellán belül található atomokon fut végig.

Ezzel a rugalmas, koherens szórás hatáskeresztmetszet a következőképpen alakul:

$$I(\Omega) \propto \frac{d\sigma_{\text{diff}}}{d\Omega} = \sum_{s,s'} p_s \left| \sum_i \langle s' | U_i | s \rangle \exp(i\mathbf{K}\mathbf{r}_i) \sum_m \exp(i\mathbf{K}\mathbf{T}_m) \right|^2. \quad (7)$$

Vegyük észre, hogy az elemi cellákon végigfutó m szerinti összegzés csak a rács translációs szimmetriájától függ! Erről a ráctényezőnek is nevezett összegről bizonyítható, hogy az N elemi cellából álló V térfogatú kristályban a következő alakkal [5] azonosan egyenlő:

$$\sum_{m,n} \exp(i\mathbf{K}[\mathbf{T}_m - \mathbf{T}_n]) = N^2 \frac{8\pi^3}{V} \sum_{\tau} \delta(\mathbf{K} - \tau_{\text{hkl}}). \quad (8)$$

A Dirac-deltás alak azt fejezi ki, hogy a diffrakciós kísérletekben a szórt hullám intenzitása csak akkor különbözik

nullától, ha a szórási vektor egy reciprokrács-vektorral egyenlő. A kristályrác translációs szimmetriája alapján ugyanis definiálhatunk egy reciprokrácsot, amely a szilárdtestfizika más területein is fontos szerepet is játszik.

A reciprokrács és a direkt rács elemi rácsvektorai között az $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$ ($i, j = 1, 2, 3$) összefüggés teremt kapcsolatot, ahol δ_{ij} a Kronecker-szimbólum (azonos indexekre 1, különböző indexekre 0). A $\boldsymbol{\tau}_{hkl} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$ reciprokrács-vektor a direkt rács pontjaira fektethető (hkl) Miller-indexű síkokat jellemzi, iránya az ilyen síkokra merőleges irány, nagysága az ilyen síkok közötti d_{hkl} távolság reciprokával arányos:

$$|\boldsymbol{\tau}_{hkl}| = \frac{2\pi}{d_{hkl}}.$$

Az elemi reciprokrács-vektorok kifejezhetőek a direkt rács elemi rácsvektorokkal:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \frac{2\pi}{V} \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3, \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{2\pi}{V} \mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1, \\ \mathbf{b}_3 &= \frac{2\pi}{V} \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2. \end{aligned} \quad (9)$$

A (8) egyenletből következő $\mathbf{K} = \boldsymbol{\tau}_{hkl}$ feltétel nagyon fontos megkötést jelent a szórt neutronnalábok szórási vektoraira nézve, és általánosabb jelentősége van a diffrakciós módszer gyakorlati megvalósítása szempontjából. Ez ugyanis a vektoriális formában kifejezett Bragg-feltétel. Az irány szerinti egyenlőség megköveteli, hogy a szórást olyan legyen, mintha a kristály (hkl) Miller-indexű síkja tükör módjára visszaverné a neutronnalábot. Ezért nevezzük a Dirac-delta-szerűen éles diffrakciós csúcsokat reflexióknak. A nagyság szerinti egyenlőség pedig a jól ismert Bragg-egyenletre vezet. Ugyanis:

$$|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| = 2 \frac{2\pi}{\lambda} \sin\theta_{hkl} = \frac{2\pi}{d_{hkl}}, \quad (10)$$

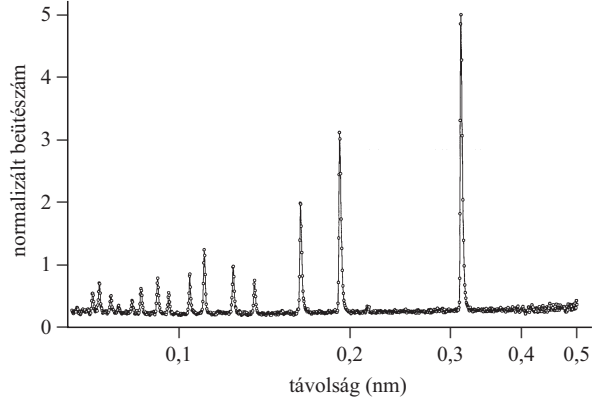
azaz

$$2d_{hkl} \sin\theta_{hkl} = \lambda.$$

Itt θ_{hkl} a beeső (és egyben a reflektált) nyalábnak a tükrözési feltételt kielégítő (hkl) Miller-indexű síkkal bezárt szöge. Ennek megfelelően a beeső és a visszavert nyaláb közötti szög $2\theta_{hkl}$.

Visszatérve a szórási hatáskeresztmetszet (7) kifejezéséhez, most már a különálló (hkl) Miller-indexű reflexiók intenzitásait is kifejezhetjük:

$$\begin{aligned} I_{hkl} &\propto N^2 \frac{8\pi^3}{V} |F(hkl)|^2 = \\ &N^2 \frac{8\pi^3}{V} \sum_{s,s'} p_s \left| \sum_i \langle s' | U_i | s \rangle \exp(i\boldsymbol{\tau}_{hkl} \cdot \mathbf{r}_i) \right|^2 = \\ &N^2 \frac{8\pi^3}{V} \sum_{s,s'} p_s \left| \sum_i \langle s' | U_i | s \rangle \exp(2\pi i(hx_i + ky_i + lz_i)) \right|^2. \end{aligned} \quad (11)$$



1. ábra. Polikristályos szilícium neutrondiffrakciós diagramja (W. Kockelmann, Rotax, ISIS, 1999)

A (hkl) Miller-indexű reflexiót tehát meghatározza a Bragg-feltétel és az itt szereplő $F(hkl)$ komplex szerkezeti tényező.

Nukleáris és mágneses szórás

A szórási hatáskeresztmetszet kifejezésében tisztázásra vár még az U_i potenciál jelentése. A neutron és az egyetlen pontba koncentrált, pontszerűnek tekintett mágneses atom U_i kölcsönhatási potenciáljának a kifejezését, a mágneses atom *neutronszórási tényezőjét* Halpern és Johnson számították ki [6] 1939-ben:

$$U_i = b_i - p_i \mathbf{S}_{\perp i} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (12)$$

Itt b_i az i -edik atom nukleáris szórási tényezője, a szórási szögtől független, izotróp mennyiség, mivel az atommag az atom méretéhez képest valóban pontszerűnek tekinthető, és a pont Fourier-transzformálja minden irányból nézve azonos. Értéke az atommag tulajdonságaitól függ, a különböző fajta izotópok esetére b_i kézikönyvekben, táblázatba foglalva megtalálható.

Az i -edik atom mágneses szórási tényezőjében p_i az atom Bohr-magneton egységekből mért μ mágneses momentumával arányos mennyiség: $p_i = 0,27 \mu_i f_i(\mathbf{K})$, ahol $f_i(hkl)$ a mágneses szórást részvevő elektronok $\rho_m(\mathbf{R})$ térbeli sűrűségfüggvényének Fourier-transzformáltja, a *mágneses alaktényező* (form faktor):

$$f(\mathbf{K}) = f(hkl) \sim \int d\mathbf{R} \rho_m(\mathbf{R}) \exp(i\mathbf{K}\mathbf{R}). \quad (13)$$

A mágneses alaktényező a röntgenszórási amplitúdóhoz hasonlóan az elektronok sűrűségfüggvényének térbeli kiterjedtsége miatt a szórási szög növekedésével erősen csökken. A legtöbb anyagban

$$\frac{|\mathbf{K}|}{4\pi} = \frac{\sin\theta}{\lambda} \geq 0,5$$

szórási szögeknél a mágneses neutronszórás intenzitása a nukleáris intenzitás néhány százalékára lecsökken. A különböző fajta atomok és ionok esetére a mágneses alaktényező mért és/vagy kiszámított függvényei az irodalomban, kézikönyvekben, cikkekben megtalálhatóak.

A neutronszórás tényező (12) képletében szereplő vektort: $\mathbf{S}_{\perp i} = \mathbf{S}_i - (\mathbf{S}_i \mathbf{K}) \mathbf{K}$ mágneses szórás vektornak nevezzük, és azt fejezi ki, hogy az \mathbf{S}_i egységvektor irányába mutató atomi mágneses momentumnak csak a $\mathbf{K}_i = \boldsymbol{\tau}_{bki}$ szórás vektorra merőleges komponense vesz részt a szórás folyamatban. Ugyanabban a (12) képletben $\boldsymbol{\sigma}$ a neutronok állapotfüggvényeire ható spinoperátor.

Végül a kölcsönhatási potenciálból kapott (12) szórás tényező kifejezését a (10) képletbe helyettesítve kapjuk a neutrodiffrakciós szerkezeti tényezőre:

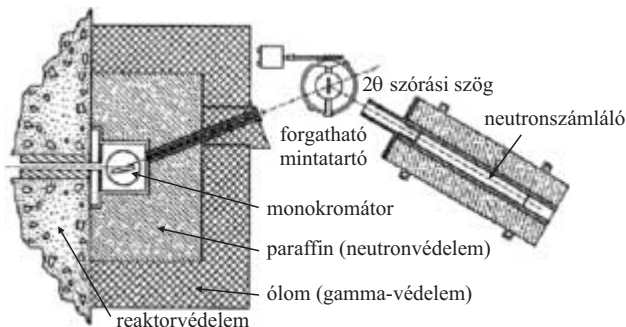
$$|F(hkl)|^2 = \sum_{s,s'} p_s \left| \sum_i \langle s' | b_i - p_i \mathbf{S}_{\perp i} \boldsymbol{\sigma} | s \rangle \exp(2\pi i (bx_i + ky_i + lz_i)) \right|^2 \quad (14)$$

Ez a szerkezeti tényező függ a beeső és a szóródott neutronok spinjétől is. A szórás amplitúdó egyes $\langle s' | U | s \rangle$ mátrixelemeit a spinállapotok és a Pauli-féle spinmátrixok ismert konkrét alakjának a felhasználásával számíthatjuk ki. A részletes számítás során a polarizált neutronokkal végzett szórás kísérletek rendkívül érdekes lehetőségeit is tárgyalhatnánk, itt azonban csak a polarizálatlan neutrodiffrakcióra kívánunk szorítkozni, amikor a beeső nyaláb $\frac{1}{2}$ spinű neutronjainak kétféle spinállapota egyenlő valószínűséggel fordul elő: $p_+ = p_- = 1/2$. Ekkor a szerkezeti tényező két, egymástól független tagra, egy nukleáris és egy mágneses szerkezeti tényezőre esik szét, a lehetséges kereszt tagok kioltják egymást:

$$I(hkl) \propto |F(hkl)|^2 = |F_n(hkl)|^2 + |F_m(hkl)|^2 = \left| \sum_i b_i \exp(2\pi i (bx_i + ky_i + lz_i)) \right|^2 + \left| \sum_i p_i \mathbf{S}_{\perp i} \exp(2\pi i (bx_i + ky_i + lz_i)) \right|^2 \quad (15)$$

A neutrodiffrakcióra is érvényes vektoriális Bragg-egyenlet a röntgendiffrakciónál megszokott kísérleti technikai következményeket vonja maga után (Laue-, forgókristályos, Debye-Scherrer mérési elrendezések, Ewald-konstrukció stb.). A kristályra eső neutronnyaláb rugalmas, koherens szóródása csak olyan irányokban lesz nullától különböző, amelyek kielégítik a reciprokrács, azaz közvetve a direkt kristályrács szimmetriatulajdonságaira jellemző Bragg-feltételt. Ilyen irányokban a térszög

2. ábra. Az első Oak Ridge-i neutrodiffraktométer sematikus rajza [7]



szert (elvileg) végtelenül keskeny reflexiós csúcsokat találunk, amelyeknek integrális intenzitása a szerkezeti tényezőtől függ. A matematika fogalmaival kifejezve a háromdimenziós, tökéletesen periodikus potenciálfüggvény Fourier-transzformálása diszkrét együtthatójú Fourier-sorhoz, a diszkrét (hkl) indexű reflexiók összegéhez vezetett.

Gyakorlatilag a valódi kristály rugalmatlan és inkoherens szórása növeli a mérést zavaró háttérintenzitást, továbbá a kristály véges mérete, a tökéletlen kísérleti elrendezés, a széttartó nyaláb, a véges detektálási térszög stb. miatt a reflexiós csúcsook is kiszélesednek. Ezekkel a korlátozásokkal azonban egy elképzelt ideális mérési elrendezésben a szórás vektorok teljes térszögtartományában meg kell mérnünk a reflexiós csúcsook intenzitását, vagyis a szerkezeti tényezők négyzetét, és a szerkezeti tényezőkből legalábbis elvileg Fourier-transzformációval előállíthatjuk a kristályrács neutronszórás (nukleáris és mágneses) potenciálfüggvényét.

Kísérleti körülmények

A neutronszórás kísérletekhez szükséges neutronfluxust gyakorlatilag csak nukleáris reaktorokból tudunk nyerni. A szilárd anyagok kristályos és mágneses szerkezetének kutatása céljából az első neutronspektrométer, vagy inkább neutrodiffraktométer, 1945-ben építették az Egyesült Államokban, az Argonne National Laboratory reaktoránál. Magyarországon a Központi Fizikai Kutató Intézet kísérleti reaktora mellett 1962 óta működik neutrodiffraktométer (sematikus rajz a 2. ábrán látható).

A reaktorokból nyerhető termikus neutronok fluxusa (a másodpercenként egységnyi felületen áthaladó részecskék száma) a reaktor teljesítményétől függően 10^{12} – 10^{15} n/s/cm² között változik. A 10^{15} n/s/cm² nagyságrendű felső határ a röntgensugárforrásokkal összehasonlítva még mindig nagyon kicsiny, ezért a neutronszórás kísérleteket mindig gondosan optimalizálni kell az adott fluxus mellett a legjobb felbontóképesség elérése céljából.

A diffrakciós kísérletekhez szükséges monokromatikus, éles energiaeloszlású nyalábot a folytonos energiaspektrumból monokromátor egykristállyal állíthatjuk elő. A kiválasztott hullámhossz általában körülbelül 0,1 nm, a Maxwell-féle sebességeloszlás termikus csúcsa.

Nyilvánvaló, hogy a monokromatizálás egy „válogatási” folyamat, amelyben a nem megfelelő energiájú neutronoktól meg kell szabadulnunk, nagyon jelentősen csökkentve ezzel a nyaláb fluxusát. A monokromátor egykristály-tulajdonságainak megválasztásával lehet elérni a nyaláb felbontóképessége és intenzitása közötti kompromiszumos optimumot.

A vizsgált anyagminta atomi léptékű kristálytani vagy mágneses szerkezete külső környezeti paraméterek függvénye. A különböző szerkezetű fázisok tulajdonságainak és a fázisok közötti átalakulásoknak a tanulmányozása céljából a paraméterek jól kézben tartott, folyamatos változtatására alkalmas berendezésekre, alacsony hőmérsékletű kriosztátokra, magas hőmérsékletű kályhára, mágnesre, nyomáskamrára stb. van szükség. Az ilyen

berendezések szerkezeti anyagainak kiválasztásakor a neutronszerkezet tulajdonságok (abszorpció, koherens és inkoherens szórás) is jelentős szerepet kapnak, a nyaláb útjába eső alkatrészeket általában alumíniumból vagy vanádiumból készítik.

A szóródott neutronok intenzitásának szögeloszlását, azaz a differenciális szórás hatáskeresztmetszetet a minta körül igen finom szögléptékkel forgatható neutronszámláló detektorral mérjük meg. A mérések hatékonyságát fokozza a pozícióérzékeny vonaldetektorok vagy kétdimenziós mátrixdetektorok alkalmazása.

A neutrondiffrakciós szerkezetvizsgálat legfontosabb elvi és gyakorlati előnyei a következőkben foglalhatók össze.

– A nukleáris szórás tényező az atomsúlynak nem monoton függvénye, ellentétben a röntgenszerkezet tényezővel. Így neutronokkal a kis rendszámú elemek szórása is jól mérhető a nagyobb rendszámú atomok mellett, például a *hidrogén* és a *deutérium* szerkezeti paraméterei is meghatározhatóak szerves anyagokban. Ugyanígy a periódusos rendszer *szomszédos elemei*, sőt azonos elem különböző *izotópjai* is lényegesen eltérő neutronszerkezet tényezőjűek lehetnek. Egyes elemek (pl. Ti, Mn stb.) nukleáris szórás tényezője (*b*) éppenséggel negatív. Egy rendezett kristály diffrakciós képében az átlagos összetételre jellemző alapreflexiókban az atomi összetevők szórás tényezőinek súlyozott összege, a kristálytani rendezettségre jellemző szuperreflexiókban pedig a szórás tényezők közötti különbségek jelennek meg. Ezért neutrondiffrakcióval a rendezett állapotnak és a rendeződés folyamatának vizsgálatára közeli rendszámú összetevőkből álló anyagi rendszerekben is lehetőség nyílik. Ennek érdekes példája az intermetallikus mangánötvözetek rendeződésének vizsgálata, ahol a rendezettségre jellemző szuperreflexiók intenzitása nagyobb lehet, mint az alapreflexióké.

– A rendezett mágneses anyagok atomi léptékű periodikus *mágneses szerkezetének* meghatározására és a kompenzálatlan mágneses momentumú elektronok sűrűségeloszlásának tanulmányozására a neutrondiffrakció egyedülálló, mással nem helyettesíthető vizsgálati módszer.

Mágneses szerkezetek vizsgálata

A neutrondiffrakció a mágneses szerkezetek meghatározásának közvetlen módszere. Rendezett mágneses szerkezetekben az atomi mágneses momentumok irány és nagyság szerint a térben periodikus elrendeződésben helyezkednek el, vagyis a kristályon belül kialakul egy „mágneses kristály”, amelynek elemi cellája nem szükségképpen azonos a kristályszerkezet elemi cellájával. A mágnesesen rendezett fázis csak egy kritikus hőmérséklet alatt marad fenn, fölötte a „mágneses kristály megolvad”, a magas hőmérsékletű paramágneses fázisban a mágneses momentumok időbeli átlaga minden kristálytani atomi pozícióban nulla.

Az átmeneti fémek részben betöltött belső elektronhéjú atomjainak természetes sajátja a rendeződő mágneses momentum. Ilyen átmeneti fémek a vas (3d), a Pd

(4d) és a Pt (5d) csoportba, a ritkaföldfémek (4f) csoportjába és az aktinidák (5f) csoportjába tartozó elemek. A 3d átmeneti fémek, azok vegyületei és ötvözetei az anyagok mágneses tulajdonságainak a kutatásában mind a tudományos érdekesség, mind a műszaki alkalmazhatóság szempontjából kezdettől fogva igen jó modellanyagoknak bizonyultak. A szilárd anyagok rendezett mágneses szerkezeteinek változatokban gazdag világát éppen a neutronszerkezet kísérletek segítettek felderíteni.

Az ismert mágneses szerkezetek jelentős hányadát a három legegyszerűbb kollineáris (azonos vektoreggyenessel jellemzett) szerkezeti típus, a ferromágneses, az anti-ferromágneses és a ferrimágneses szerkezetek valamelyikébe tudjuk besorolni.

A diffrakciós módszerek ismert hátránya a mért szerkezeti tényezőknek – a szóró potenciál Fourier-komponenseinek – a fázis szerinti bizonytalansága. A mágneses szerkezetek neutrondiffrakciós meghatározása során további információvesztést jelent az, hogy a mágneses momentumoknak csak a szórás vektorra merőleges komponense vesz részt a szórásban.

Így a mágneses szerkezetek meghatározása is általában, próba-hiba (*trial and error*) módszerrel történik. Az előzetes röntgendiffrakciós, klasszikus mágneszettség, szuszceptibilitás, anizotrópia, Mössbauer-effektus és egyéb mérésekből általában az anyag kristályszerkezetét, makroszkopikus mágneses tulajdonságait, mágneses szimmetriáit és orientációját ismertnek vehetjük. A neutrondiffrakciós kép alapvető tulajdonságaiból meríthető néhány (pl. a mágneses elemi cella méreteire vonatkozó) útmutatás alapján mágneses szerkezeti modelleket konstruálunk, azaz a mágneses elemi cella atomjaihoz meghatározott irányú és nagyságú mágneses momentumokat rendelünk. Minden modellhez kiszámítjuk a szerkezeti tényezőket, és megvizsgáljuk, hogy melyik modell számított szerkezeti tényezői képesek számot adni a mért neutrondiffrakciós kép intenzitásvizonyairól. Ez a módszer természetesen mindig tartalmazza a többértelműség elvi lehetőségét, de nem túlságosan bonyolult, mágneses elemi cellájú anyagokban általában a lehetséges, egymástól minőségileg különböző modellek teljes családja áttekinthető.

A modellek megkonstruálásához a módszeres intuíció mellett fontos segítséget nyújthat a mágneses tércsoportok számbavétele és a kristálytani tércsoportok irreducibilis ábrázolásainak ismerete.

A lehetséges mágneses szerkezetek kiválasztásának egyik gyakorlatilag használható, algoritmizált matematikai módszere a másodrendű fázisátalakulások Landau-féle elméletén alapul. Ennek lényege, hogy a kritikus pontban másodrendű fázisátalakulással kialakuló mágneses szerkezet szimmetriacsoportja a paramágneses fázis szimmetriacsoportjának az alcsoportja lesz. A lehetséges mágneses szimmetriacsoport kiválasztása céljából a rendszer termodinamikai potenciálját a kristálytani tércsoport irreducibilis ábrázolásainak bázisfüggvényei szerint sorbafejtjük, és a sorfejtési együtthatókat a Landau-elmélet szerint kirótt feltételek a megfelelő alcsoport kiválasztására vezetnek. A fázisátalakulás másodrendű jellegének kikötésével az adott kristálytani tércsoport lehetséges mágneses szerkezetei közül egy leszűkített osztályt kapunk meg, viszont a

csoportműveletek alkalmazásával a mágneses szerkezet finom részleteiről is kaphatunk információt. Ennek az elméleti módszernek az első sikere az $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ vegyület gyenge ferromágnesességének értelmezése volt.

A neutrondiffrakcióval meghatározott mágneses szerkezetek leírása összefoglaló gyűjteményekben megtalálható. Oles és munkatársai 1976-ban az addig általuk ismert összes irodalmi adatot könyv formájában adták ki [8]. Egy másik kiadvány folyamatos megjelenésű, a Nemzetközi Krisztallográfiai Unió (IUCr) Neutrondiffrakciós Bizottsága 1972 óta gyűjti és az előfizetőknek továbbítja az új neutrondiffrakciós eredményeket befűzhető dossziélapok formájában [9].

Néhány hazai eredmény

1966 és 1973 között néhány érdekes eredmény született a KFKI kísérleti atomreaktora mellett működő neutrondiffraktométeren a vegyületszerű összetétellel rendeződő intermetallikus mangánötvözetek (Mn_3Pt , MnPt , $\text{Mn}_3(\text{Rh},\text{Pt})$, MnPd_3 , MnPd_2 , Mn_3Pd_5 , MnPd , Mn-Ge és Mn-Ga) antiferromágneses szerkezeteinek tanulmányozása közben.

Talán a legfontosabb lelemény egy antiferromágneses–antiferromágneses elsőrendű fázisátalakulás felfedezése, részletes vizsgálata és elméleti értelmezési kísérlete volt az Mn-Pt ötvözetrendszer Mn_3Pt összetételű intermetallikus fázisa környezetében. Egy diplomamunka tárgya volt az ismert Cu_3Au kristályszerkezeti típusú Mn_3Rh ötvözet háromszöges mágneses szerkezetének és a mágneses fázis „megolvadását” jelentő kritikus Néel-hőmérsékletének a tanulmányozása a $\text{Mn}_3(\text{Rh},\text{Pt})$ háromalkotós ötvözetrendszerben. Egy napon az Mn_3Pt összetételű mintában folyékony nitrogén hőmérsékletéről (77 K) fel-fűtve mértük a kristálytani elemi cellával azonos mágneses elemi cellájú háromszöges antiferromágneses fázis jellemző mágneses reflexióját a Néel-pont meghatározása céljából. Estefelé a mágneses járulék szobahőmérséklet alatt nullára csökkent, így megnyugodva abban, hogy a Néel-pontot megmértük, az éjszaka folyamán programozott mérés fel akartunk venni a nukleáris diffrakciós diagrammot a vélt szobahőmérsékletű paramágneses fázisban az újonnan automatizált diffraktométer-elektronika segítségével. Reggel csodálkozva láttuk, hogy a nukleáris reflexiókon kívül új reflexiók jelentek meg feles Miller-indexű pozíciókban, ami nyilvánvalóan kettőzött elemi cellájú, új mágneses szerkezet megjelenését jelezte. Ennek az antiferromágneses–antiferromágneses elsőrendű fázisátalakulásnak a létezését korábban a szakirodalomban nem ismerték. Ezzel indult az a kutatási program, amelynek az eredményeit elég jó impakttal sikerült több lépésben közölni [10, 11].

A másik értékelhető eredmény az Mn-Pd ötvözetrendszerben két új, korábban nem ismert intermetallikus fázis kristálytani és mágneses szerkezeteinek a meghatározása [12–14]. Az MnPd_2 és az Mn_3Pd_5 fázisok rendezett kristályszerkezetét, az atomi pozícióparamétereket éppen a mangánatom negatív neutronszerzési amplitúdója következtében sikerült a szuperreflexiókból elfogadható pontossággal kiszámítani.

Mindkét fentebb említett ötvözetrendszerben és a Mn-Ni rendszerben is az 50–50% összetétel környezetében tetragonális CuAu-I típusú kristályszerkezetű MnPt , MnPd és MnNi intermetallikus fázisokat találtunk, azonos antiferromágneses szerkezettel, amelyeknek a részletes vizsgálata [15] az Intézet kutatói közösségében a rendelkezésre álló eszközökkel Pál Lénárd aktív részvételével történt. Sokáig azt gondolhattuk, hogy ezek a drága nemesfémekkel ötvözött, mereven törekeny, nulla mágneszettségű „good for nothing” anyagok csak az alap kutatás szempontjából voltak fontosak. A Winchester típusú mágneses lemeztárolókban az utóbbi évtizedben az óriási mágneses ellenállás-változás jelenségén alapuló kiolvasó fejeket alkalmaznak. Ezekben az úgynevezett spinszelepekben az egyik ferromágneses réteg mágneszettségének irányát egy antiferromágneses mangánötvözetű vékonyréteggel célszerű az alkalmazott külső tértől függetlenül rögzíteni. Meglepetéssel tapasztalhattuk, hogy az itt felsorolt kutatási eredmények, amelyek több mint 30 évvel ezelőtt annyi intellektuális örömet okoztak, gyakorlati alkalmazást is nyertek, és ismét a tudományos közvélemény érdeklődésére számíthatnak.

Irodalom

1. J.D. WATSON, F.M. CRICK – Nature 177(1953) 964
2. C.B. SHULL, S. SMART – Phys. Rev. 76(1949) 1256
3. L.D. LANDAU, E.M. LIFSHIC: *Kvantummechanika* – Tankönyvkiadó, Budapest, 1978.
4. L.W. MARSCHALL, S.W. LOVESEY: *Theory of Thermal Neutron Scattering* – Clarendon Press, Oxford, 1971.
5. CH. KITTEL: *Quantum Theory of Solids* – Wiley, London, 1963.
6. O. HALPERN, M.H. JOHNSON – Phys. Rev. 55(1939) 878
7. E.O. WOLLAN, C.G. SHULL – Phys. Rev. 73(1948) 830
8. A. OLES, KAJZAR, M. F. KUCAB, W. SIKORA: *Magnetic Structures Determined by Neutron Diffraction* – Polska Akademia Nauk, Warszawa/Kraków, 1976.
9. *Magnetic Structure Data Sheets* (szerk. D.E. Cox) – Brookhaven National Laboratory, Upton, New York, 1972-től folyamatosan
10. E. KRÉN, G. KÁDÁR, L. PÁL, J. SÓLYOM, P. SZABÓ – Physics Letters 20(1966) 331
11. E. KRÉN, G. KÁDÁR, L. PÁL, J. SÓLYOM, P. SZABÓ, T. TARNÓCZI – Phys. Rev. 171(1969) 574 (94 hivatkozás a két cikkre, 2005-ben is)
12. G. KÁDÁR, E. KRÉN, M. MÁRTON – Journal of Physics and Chemistry of Solids 33(1972) 212
13. G. KÁDÁR, E. KRÉN – Solid State Communications 11(1972) 933
14. G. KÁDÁR, E. KRÉN, L. PÁL – AIP Conference Proceedings 18(1974) 421
15. L. PÁL, E. KRÉN, G. KÁDÁR, P. SZABÓ, T. TARNÓCZI J. Appl. Physics 39(1968) 538 (53 hivatkozás, 2005-ben is)

Szerkesztőség: 1027 Budapest, II. Fő utca 68. Eötvös Loránd Fizikai Társulat. Telefon/fax: (1) 201-8682

A Társulat Internet honlapja <http://www.elft.hu>, e-postacím: mail.elft@mtsz.hu

Kiadja az Eötvös Loránd Fizikai Társulat, felelős: Berényi Dénes főszerkesztő.

Kéziratokat nem őrzünk meg és nem küldünk vissza. A szerzőknek tiszteletpéldányt küldünk.

Nyomdai előkészítés: Kármán Tamás, nyomdai munkálatok: OOK-PRESS Kft., felelős vezető: Szathmáry Attila ügyvezető igazgató.

Terjeszti az Eötvös Loránd Fizikai Társulat, előfizethető a Társulatnál vagy postautalványon a 10200830-32310274-00000000 számú egyszámlán.

Megjelenik havonta, egyes szám ára: 600.- Ft + postaköltség.

HU ISSN 0015-3257