

ΣΥΝΕΔΡΙΑ ΤΗΣ 9ΗΣ ΔΕΚΕΜΒΡΙΟΥ 1993

ΠΡΟΕΔΡΙΑ ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΥ ΔΕΣΠΟΤΟΠΟΥΛΟΥ

ΦΥΣΙΚΗ.— Φασματοσκοπική μελέτη Compton των Ἀλλοτροπικῶν Μορφῶν θείου.  
Σχέση δομῆς καὶ ἠλεκτρονικῶν κατανομῶν ὀρμῶν, ὑπὸ Τίνας Χατζηγεωργίου-  
Ἀλεξανδροπούλου\*, διὰ τοῦ ἀντεπιστέλλοντος μέλους τῆς Ἀκαδημίας κ. Νικολάου Ἀλεξανδροπούλου.

Ε Ι Σ Α Γ Ω Γ Η

Τὸ θεώρημα Bloch<sup>1</sup> καὶ τὸ περιοδικὸ μοντέλο Kronig Penny<sup>2</sup> ἀποτέλεσαν τὰ ὀρόσημα, μὲ τὰ ὁποῖα ἡ κατανόηση τῶν ἰδιοτήτων τῶν κρυσταλλικῶν ἡμιαγωγῶν καὶ μονωτῶν πέρασε ἀπὸ τὸ ἡμιεμπειρικὸ στὸ ἐπιστημονικὰ θεμελιωμένο στάδιο. Μὲ βάση τὴ θεωρία ζωνῶν, οἱ ἠλεκτρονικὲς μακροσκοπικὲς ἰδιότητες κατανόηθηκαν ποσοτικά, ὑποθέτοντας τὴν ὑπαρξὴ ἑνὸς περιοδικοῦ δυναμικοῦ μακρᾶς ἐμβέλειας (σχ. 1).

Ἡ κατανόηση αὐτὴ εἶχε ὡς ἐρευνητικὸ καὶ τεχνολογικὸ ἐπίτευγμα τὴν ἐφεύρεση τῆς κρυσταλλοτριόδου. Ἡ ἐφεύρεση τῆς κρυσταλλοτριόδου ἔθεσε τὴν τεχνολογία τῶν ἠλεκτρονικῶν ἐπὶ τελείως νέας βάσεως μὲ ἀποτέλεσμα οἱ τεχνολογικὲς ἐφαρ-

---

\* CHATZIGEORGIU-ALEXANDROPOULOU TINA, *γ-Ray Compton Spectroscopy studies of Allotropic forms of sulfur. Relation between structure and electron momentum distribution.*

Ἡ ἐργασία αὐτὴ συνοψίζει τὰ ἀποτελέσματα τῆς τελευταίας ἐρευνητικῆς προσπάθειας τῆς Τίνας Χατζηγεωργίου-Ἀλεξανδροπούλου ὅπως συνετέθη ἀπὸ τοὺς συνεργάτες της, τὸ προσωπικὸ τοῦ Ἐργαστηρίου ἀκτίνων-Χ τοῦ Πανεπιστημίου Ἰωαννίνων, μετὰ τὸ θάνατό της, μὲ βάση τὰ χειρόγραφα της καὶ τίς ἐργαστηριακὲς της σημειώσεις.

1. Ἡ κυματοσυνάρτηση τοῦ ἠλεκτρονίου σὲ περιοδικὸ δυναμικὸ δίδεται ἀπὸ τὴ σχέση  $\Psi(r) = e^{ik \cdot r} u(r)$ , ὅπου  $u(r)$  περιοδικὴ συνάρτηση τῆς ἴδιας περιόδου.

2. Proc. Roy Soc. **A130**, 499, (1930).

μογές να είναι σήμερα ευρύτερες και από τις προβλεπόμενες από την πλέον αχαλί-  
νωτη φαντασία τής εποχής τής εφευρέσεως τής κρυσταλλοτριόδου.



Σχ. 1. Περιοδικό ηλεκτροστατικό δυναμικό μακράς έμβειας  
(Προσέγγιση Kronig-Penny).

Ἡ χρησιμοποίηση τέλειων μονοκρυστάλλων για τήν κατασκευή ἡλεκτρονικῶν διατάξεων εἰρηνικῶν ἐφαρμογῶν δέν παρουσιάζει κανένα μειονέκτημα, αὐτό ὅμως δέν συμβαίνει και γιά τίς ἡλεκτρονικές διατάξεις ὀπλικῶν συστημάτων. Ἡ παρουσία ραδιενέργειας προκαλεῖ καταστροφές στοὺς τέλειους κρυστάλλους, ὥστε νά εἶναι προβληματική ἡ λειτουργία ἡλεκτρονικῶν διατάξεων πού χρησιμοποιοῦν τέτοιους κρυστάλλους ὅταν βρίσκονται σέ πεδία ἔντονης ραδιενέργειας.

Κατά τήν περίοδο τοῦ ψυχροῦ πολέμου, ἀμυντικές και ἐπιθετικές στρατηγικές βασίζονταν σέ κατασκοπευτικούς δορυφόρους γιά τήν ἔγκαιρη προειδοποίηση και τηλεπικοινωνιακοὺς δορυφόρους γιά τήν ἄμεση ἔναρξη ἀντιποίνων. Οἱ δύο αὐτές κατηγορίες δορυφόρων θά ἀποτελοῦσαν τόν πρῶτο στόχο τοῦ ἐπιτιθέμενου. Ἡ καταστροφή δορυφόρου σέ διαστημική τροχιά διά προσκρούσεως ἐπ' αὐτοῦ ἐκρηκτικῆς διατάξεως ἀποτελεῖ κινηματογραφικό σενάριο μόνο, ἐνῶ κατά τόν ἐπιτελικό σχεδιασμό αὐτό θά ἐπιτυγχάνετο μέ μικρή πυρηνική ἐκρηξη στήν περιοχή τοῦ δορυφόρου. Ἡ ἐκρηξη αὐτή θά ἄφηνε τόν δορυφόρο μηχανικά σχεδόν ἀνέπαφο, ἐνῶ θά κατέστρεφε τά ἡλεκτρονικά κυκλώματα πού περιεῖχε. Λύση στό πρόβλημα αὐτό ἀναζητήθηκε στήν ἀνεύρεση στερεῶν τά ὁποῖα θά παρουσίαζαν ἡλεκτρονικά χαρακτηριστικά ὅμοια

μέ αυτά τῶν τέλειων κρυστάλλων ἀλλά ἀνθεκτικά στή ραδιενέργεια. Ἔτσι ἀνακαλύφθηκαν οἱ ἄμορφοι ἡμιαγωγοὶ καὶ ἀναπτύχθηκε μιὰ νέα τεχνολογία μέ αὐτοῦς ὡς βάση.

Τὰ ἄμορφα ἢ ἀλλιῶς τὰ μὴ κρυσταλλικά ὕλικά, χαρακτηρίζονται ἀπὸ τὴν ἀπουσία τάξης μεγάλης ἀποστάσεως ἢ ἀλλιῶς περιοδικότητας μακρῆς ἐμβέλειας, ἀν καὶ ὑπάρχει καλῶς καθορισμένη σταθερὴ δομὴ στὴν ἄμεση γειτονεία κάθε ἀτόμου, καὶ ἐπομένως ὑπάρχει τάξη μικρῆς ἐμβέλειας.

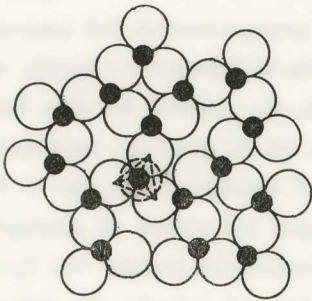
Τὸ σχ. 2 παριστάνει μιὰ δισδιάστατη προβολὴ δύο ἀλλοτροπικῶν φάσεων τοῦ  $\text{SiO}_2$ : τὴν ἄμορφη (γυαλί) καὶ τὴν κρυσταλλικὴ τοῦ χαλαζία<sup>3</sup>. Μὲ μιὰ προσεκτικὴ παρατήρηση διαπιστώνεται ὅτι ἡ διάταξη τῶν πλέον πλησιέστερων γειτόνων εἶναι ἢ ἴδια τόσο γιὰ τὴν ἄμορφη ὅσο καὶ γιὰ τὴν κρυσταλλικὴ φάση ὅπως φαίνεται στὸ σχ. 2γ.

Ἡ διαπίστωση ὅμως ὅτι μερικὰ ἀπὸ τὰ στοιχεῖα, ἢ τὶς ἐνώσεις, ποὺ βρίσκονται

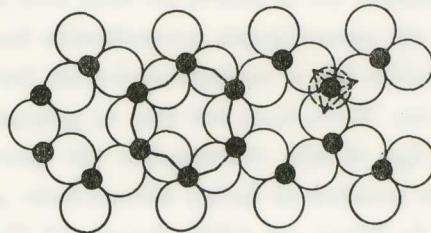
## ΔΟΜΗ ΤΗΣ ὙΛΗΣ

**ΑΜΟΡΦΟΣ**  
περιοδικότητα μικρῆς ἐμβέλειας

**ΚΡΥΣΤΑΛΛΙΚΗ**  
περιοδικότητα μεγάλης ἐμβέλειας

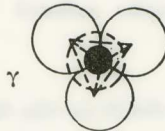


α



β

**Ἡ ἴδια διάταξη πλησιέστερων γειτόνων**



γ

Σχ. 2. Δομὴ τῆς ὕλης: α) ἄμορφη, β) κρυσταλλικὴ, γ) διάταξη πλησιέστερων γειτόνων.

3. Van Vlack «Elements of Materials science and Engineering» Addison-Wesley Publishing Co. 1975.



σέ κρυσταλλική και σέ άμορφη φάση παρουσιάζουν όμοιες μακροσκοπικές ηλεκτρονικές και όπτικές ιδιότητες και στις δύο φάσεις, όδηγεϊ στή σκέψη ότι θα πρέπει νά αναζητηθεϊ ή κατανόηση τών φαινομένων αυτών σέ ένα γενικότερο μοντέλο, του όποίου τó υπάρχον μοντέλο τών ενεργειακών ζωνών νά αποτελεϊ μιá προσέγγιση.

Μιá τέτοια προσπάθεια προϋποθέτει τή συλλογή όσο δυνατόν περισσότερων πειραματικών δεδομένων για τήν ηλεκτρονική δομή τών χημικών στοιχείων που έμφανίζονται σέ περισσότερες από μιá φάση, και σάν τέτοιο στοιχείο επιλέχθηκε τó θεϊο.

Τó θεϊο, τó όποιο όφείλει τó όνομά του στις καθαρτικές και άπολυμαντικές ιδιότητές του, είναι γνωστό τουλάχιστον από τήν εποχή του Όμήρου, ό όποιος τó αναφέρει στήν Όδύσεια<sup>4</sup> ενώ αναφέρεται επίσης σέ πολλά χωρία τής Παλαιάς Διαθήκης<sup>5</sup>, ή δέ λατινική του όνομασία πιθανόν νά έχει τή ρίζα της στά σανσκριτικά. Είναι τó στοιχείο τó όποιο έχει μελετηθεϊ περισσότερο από κάθε άλλο και έμφανίζεται σέ ποικίλες μορφές. Αναρίθμητες είναι επίσης οι εφαρμογές που έχει βρεϊ τó θεϊο διαμέσου τών αιώνων. Η χαρακτηριστική όσμή και τó ποικιλόχρωμο τής φλόγας του συνέβαλαν στό νά του άποδοθοϋν μυστικιστικές ιδιότητες γι' αυτό και χρησιμοποιήθηκε άρχικά σέ διάφορες τελεουργίες όπως αυτή που αναφέρεται στήν Όδύσεια.

Χρησιμοποιήθηκε εύρύτατα επίσης στή φαρμακευτική και τήν πολεμική τέχνη και γενικότερα άξιοποιήθηκε εύρύτατα στήν τεχνολογία τών υλικών. Τó σημερινό ενδιαφέρον για τή μελέτη του θεϊού είναι μεγάλο διότι χρησιμοποιεϊται από φάρμακο για τήν καταπολέμηση φυτοασθενειών έως ως πρόσμιξη σέ ήμιαγωγούς ύψηλης τεχνολογίας ενώ οι περιβαλλοντολογικές επιδράσεις αυτής τής χρήσεως δέν είναι άσημαντες. Έκτός όμως από όλες τις χρήσιμες εφαρμογές και τις άρνητικές επιπτώσεις που έχει τó θεϊο, τó ενδιαφέρον τών έρευνητών γι' αυτό πηγάζει κυρίως από τó ότι είναι μοναδικό σέ αριθμό άλλοτροπικών μορφών στοιχείο και μπορεί νά χρησιμεύσει ως δείγμα για πολλές έρευνες. Οι 47 περίπου άλλοτροπικές μορφές<sup>6</sup> που έχουν αναφερθεϊ μέχρι σήμερα<sup>7</sup> έχουν τήν προέλευσή τους είτε στή διάταξη τών ατόμων στό μόριο, γνωστές ως ένδομοριακές άλλοτροπίες, είτε στή διάταξη τών ατόμων και μορίων στή μοναδιαία κυψελίδα, γνωστές ως μεταξϋ-μορίων άλλοτροπίες. Η πληθώρα αυτή τών άλλοτροπικών μορφών καθιστά τó θεϊο μοναδικό δείγμα για τή με-

4. «οϊσε θεϊον, γρηή κακών άκος, οϊσε δέ μοι πϋρ, ύφρα θεειώσω μέγαρον» (Όδύσεια χ-481).

5. «και κύριος έβρεξεν επί Σόδομα και Γόμορα θεϊον και πϋρ παρά κυρίου εκ του οϋρανού» (Γένεσις 19-24).

6. Meyer B. Chem. Rev. 76, 367, 1976.

7. Υπάρχει κάποια άσάφεια για τόν ακριβή αριθμό δεδομένου ότι μερικές από τις φυσικές του ιδιότητες εξαρτώνται από τήν θερμική προϊστορία του εκάστοτε δείγματος.

λέτη τής επίδρασης που έχει ή μεταξύ τών ατόμων απόσταση και ή γωνία μεταξύ τών χημικών δεσμών, στις ιδιότητες τών ηλεκτρονίων σθένους, ή αλλιώς, πώς επιδρά ή χωρική δομή πάνω στην ηλεκτρονική δομή. Το πλεονέκτημα αυτό του θείου αντισταθμίζεται δυστυχώς από δύο μειονεκτήματα, το βασικότερο τών οποίων είναι ή δυσκολία παρασκευής αύστηρως μονοφασικών δειγμάτων με αποτέλεσμα να μὴ είναι πάντα δυνατή ή μονοσήμαντη έρμηνεία πειραματικών δεδομένων. Το άλλο μειονέκτημα είναι ή εύκολία με την οποία εξαχνώνεται το θείο, με αποτέλεσμα όλες εκείνες οι πειραματικές μέθοδοι που απαιτούν διατάξεις ύψηλου κενού, να μὴ μπορούν να χρησιμοποιηθούν στη μελέτη του.

Στην παρούσα μελέτη το μὲν πρόβλημα τής καθαρότητας τής φάσεως αντιμετωπίστηκε με την κατασκευή διατάξεως ή οποία επιτρέπει την «*in situ*» μέτρηση, το δὲ πρόβλημα εξαχνωσης του θείου αντιμετωπίστηκε δια τής επιλογῆς μεθόδου ή οποία δὲν απαιτεῖ ύψηλό κενό.

### Πείραμα

Ἡ μέθοδος που χρησιμοποιήθηκε είναι ή φασματοσκοπία<sup>8,9</sup> Compton ακτίνων -γ, τής οποίας ή αρχή σκιαγραφείται στο σχ. 3. Φωτόνιο γνωστῆς ενέργειας  $\omega$ , και ὀρμῆς  $k$ , σκεδάζεται μη ἔλαστικά με ηλεκτρόνιο ἄρχικῆς ὀρμῆς την οποία ἐπιθυμοῦμε να προσδιορίσουμε.

Ὁ προσδιορισμὸς αὐτὸς μπορεῖ να ἐπιτευχθεῖ με την εὔρεση τής ἐνέργειας τοῦ σκεδαζόμενου φωτονίου καθώς και τής ὀρμῆς τοῦ ηλεκτρονίου μετά τή σκέδαση<sup>10</sup>, ἀπὸ τή μορφή δὲ τοῦ φάσματος τής μη ἔλαστικά σκεδαζόμενης ἀκτινοβολίας συνάγεται ή κατανομή τών ηλεκτρονικῶν ὀρμῶν.

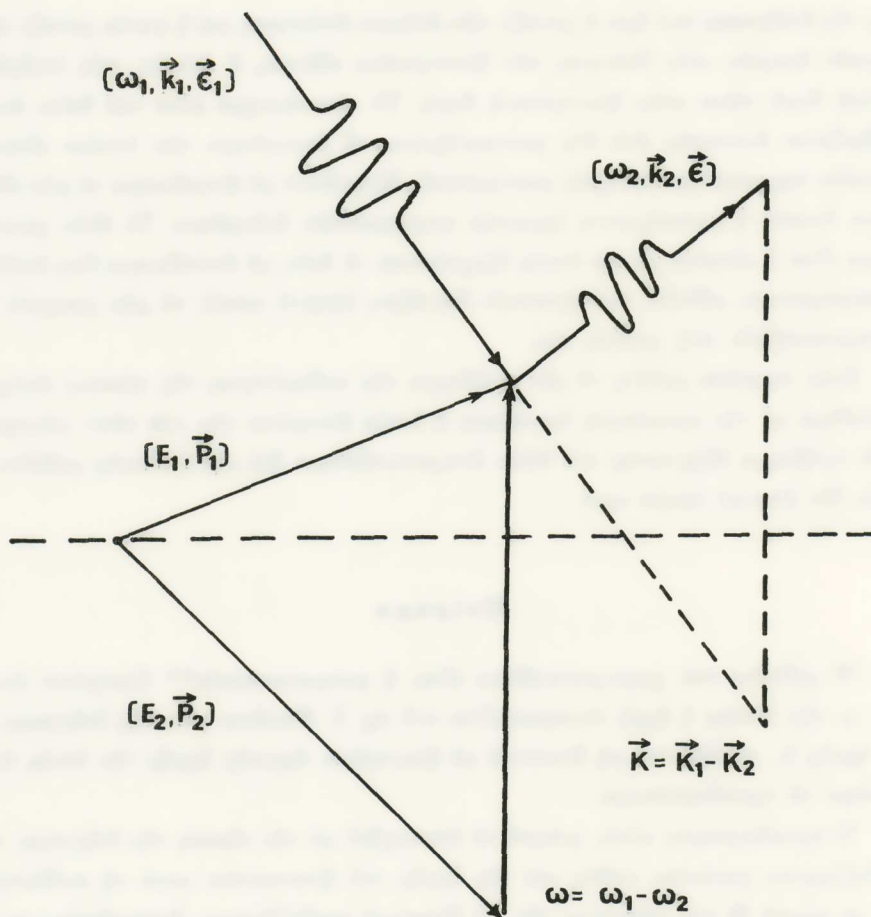
Ἡ σχέση μεταξύ πυκνότητας ηλεκτρονικῶν ὀρμῶν  $n(p)$  τοῦ σκεδαστῆ και τής μορφῆς τοῦ φάσματος Compton είναι:

$$J(P_Z) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} n(p) \, dp_x \, dp_y \quad 4$$

8. Williams, B., «Compton Scattering» McGraw-Hill N.Y. (1977).

9. Cooper MjJ., Rep. Prog. Phys. **48**, 415 (1985).

10. Ἡ μέθοδος αὐτή είναι γνωστή ὡς ARCREX (Angular Resolved Compton Recoil Electron Spectroscopy) Alexandropoulos N.G. 2nd European Conference on Progress in X-Ray Synchrotron Radiation Research Proceedings, Balerna A. Bernieri E. and Mobilio S. eds Bologna-Italy (1990).



Σχ. 3. Ἀρχὴ τῆς μεθόδου φασματοσκοπίας Compton ἀκτίνων -X καὶ ἀκτίνων -γ.

γιὰ τὴν περίπτωση μονοκρυστάλλων, ἐνῶ γιὰ τὴν περίπτωση ὁμογενῶν καὶ ἰσότροπων σκεδαστῶν δίνεται ἀπὸ τὴν ἀπλουστευμένη σχέση:

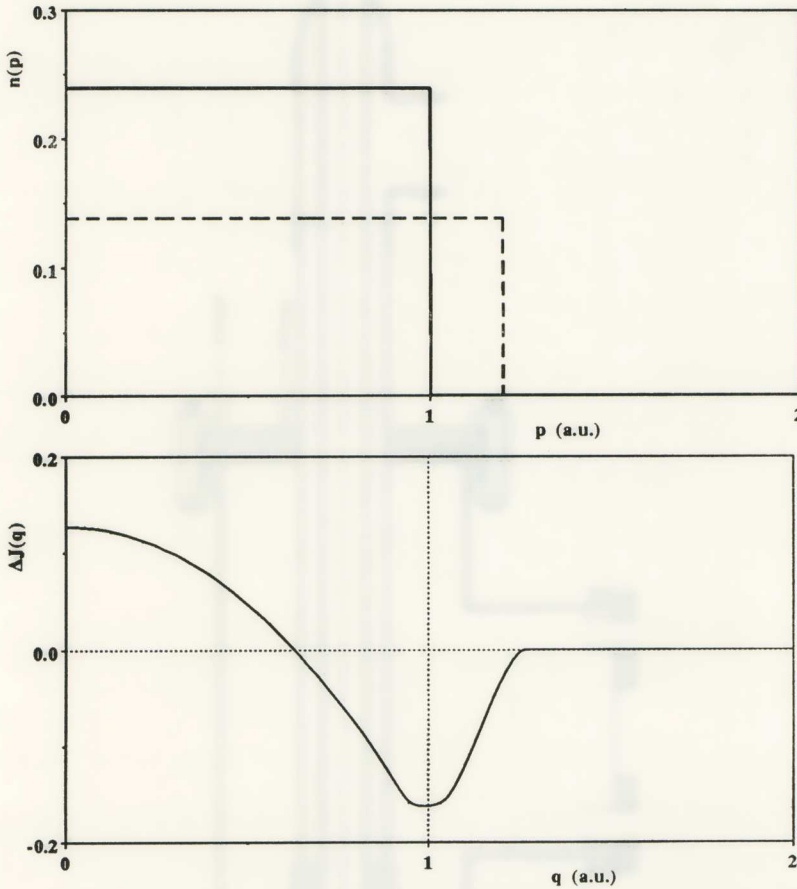
$$J(q) = \frac{1}{2} \int_{|q|}^{\infty} 4\pi n(p) dp \quad 2$$

Διαφορετικὲς ἠλεκτρονικὲς κατανομὲς ὀδηγοῦν σὲ διαφορετικὰ φάσματα Compton οὕτως ὥστε ἀπὸ τῆς διαφορᾶ  $\Delta J(q)$  μεταξύ δύο φασμάτων Compton, προερχομένων ἀπὸ δύο διαφορετικὲς κατανομὲς ἠλεκτρονικῶν ὁρμῶν, προσδιορίζεται ἡ διαφορὰ αὐτῆ, ὅπως σκιαγραφεῖται στὸ σχ. 4.

Ἐπομένως ἡ ἐπίδραση τὴν ὁποία ἔχει ἡ ἀλλαγὴ τῆς χωροταξικῆς δομῆς ἐπὶ



τῆς κατανομῆς τῶν ἠλεκτρονικῶν ὀρμῶν τῶν ἠλεκτρονίων σθένους δύναται νὰ προσδιοριστεῖ πειραματικά μετὰ τὴ Φασματοσκοπία Compton ἀκτίνων -X ἢ ἀκτίνων -γ.

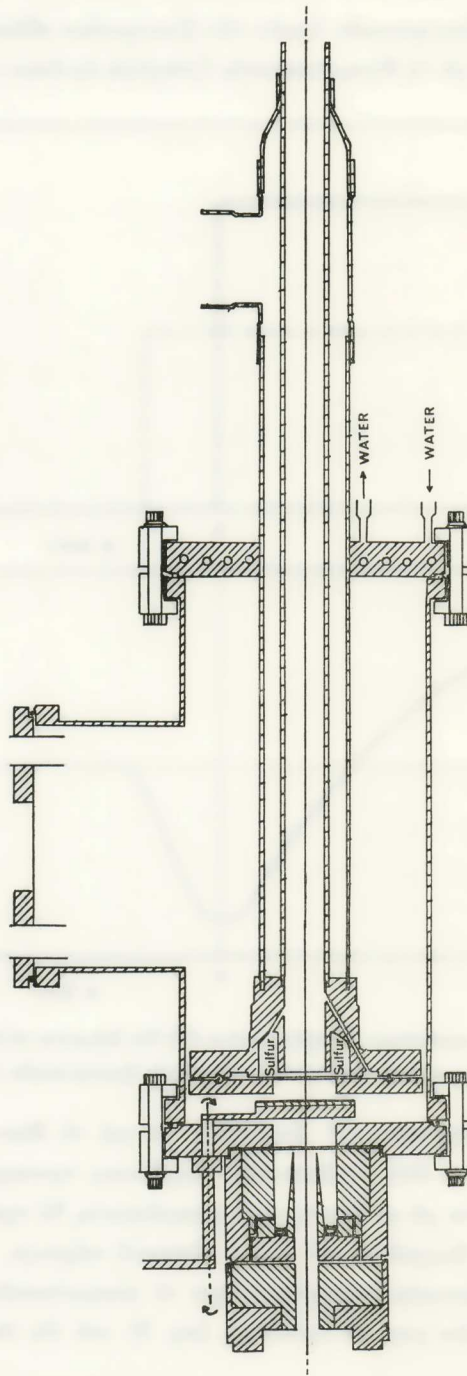


Σχῆμα 4. Ἡ διαφορά τῶν φασμάτων Compton (κάτω ἀπὸ δύο δείγματα τὰ ὁποῖα ἔχουν μὲν τὴν αὐτὴ ἠλεκτρονικὴ πυκνότητα ἀλλὰ διαφορετικὲς κατανομὲς ἠλεκτρονικῶν ὀρμῶν  $n(p)$  (ἄνω).

Σὲ παλαιότερη δημοσίευση<sup>11</sup> ἀπεδείχθη ὅτι γιὰ νὰ ἐλαττωθοῦν οἱ ἀσάφειες οἱ ὁποῖες ὑπείσρχονται ἀπὸ τὶς ἀναγκαῖες διορθώσεις προκειμένου νὰ συγκριθοῦν τὰ πρωτογενῆ δεδομένα μετὰ τὰ θεωρητικὰ συμπεράσματα, θὰ πρέπει νὰ συγκρίνονται φασματικὲς διαφορὲς δειγμάτων τοῦ αὐτοῦ «ὀπτικοῦ πάχους».

Στὴν παρούσα ἐργασία χρησιμοποιήθηκε τὸ φασματοσκόπιο Compton ἀκτίνων -γ τοῦ ἐργαστηρίου μας μετὰ προσθήκη (σχ. 5) γιὰ τὶς *in situ* μετρήσεις τῶν

11. Alexandropoulos N., Chatzigeorgiou T. and Theodoridou I., Phil. Mag. **B57** 191 (1988).



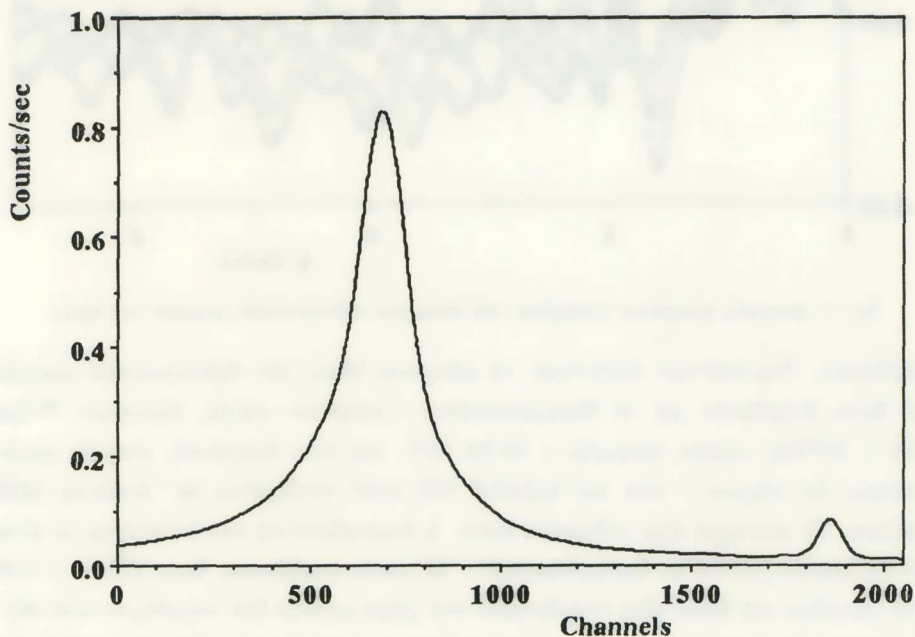
Σχ. 5. Φασματοσκόπιο Compton ακτίνων  $\gamma$  με την προσθήκη για τις in situ μετρήσεις του φάσματος Compton του θείου.



άλλοτροπικών μορφών του θείου. Η ανάγκη των *in situ* μετρήσεων υπαγόρευσε όπως το γεωμετρικό πάχος παραμένει σταθερό, με αποτέλεσμα το οπτικό πάχος το οποίο παραμένει σταθερό κατά τη θέρμανση να αλλάζει κατά τη διεργασία συλλογής δεδομένων όταν το θείο ψυχόμενο στερεοποιείται.

Τούτο είχε ως συνέπεια, εκτός των διορθώσεων που έγιναν λόγω πυκνότητας<sup>12</sup>, να αναπτυχθεί μέθοδος για τον πειραματικό προσδιορισμό του αληθοῦς σφάλματος των μετρήσεων με τη σύγκριση φασμάτων τα όποια *a priori* είναι γνωστό ότι είναι τα ίδια.

Το σχ. 6 αποτελεί ένα τυπικό φάσμα  $M(\omega)$  σκεδαζόμενης ακτινοβολίας ακτίνων  $\gamma$  ενέργειας 59.54keV, από παστίλια θείου διαμέτρου 24mm και πάχους 1.8 mm. Η πρὸς τὰ δεξιὰ κορυφή προέρχεται ἀπὸ ἐλαστική σκέδαση ἀπὸ τὰ δέσμια ἠλεκτρόνια τοῦ θείου καὶ ἐπομένως εἶναι ἀνεξάρτητη τῆς κρυσταλλικῆς δομῆς τοῦ δείγματος σὲ ἀντίθεση πρὸς τὴν πρὸς τὰ ἀριστερὰ κορυφή, τῆς μὴ ἐλαστικῆς σκεδάσεως (Compton).

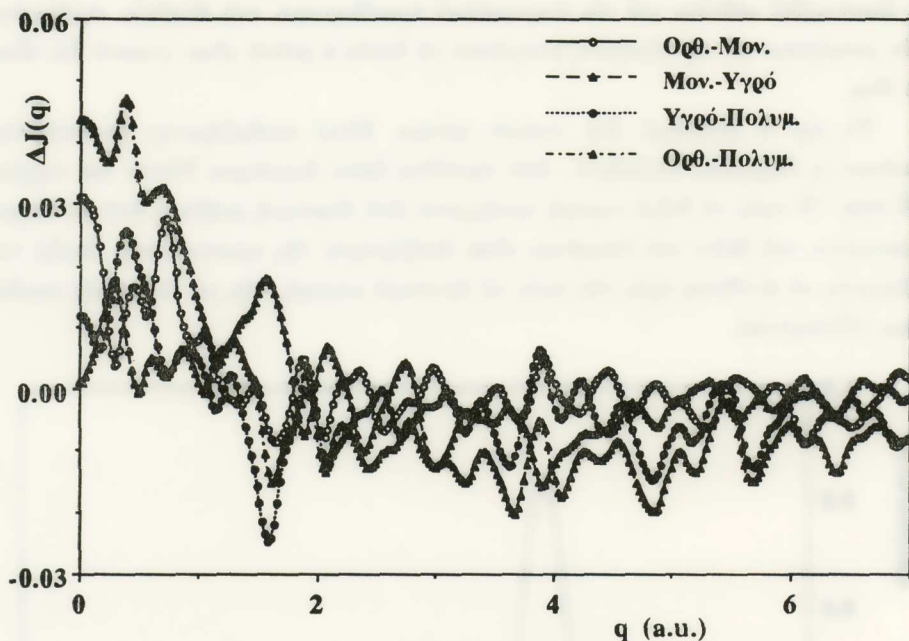


Σχ. 6. Τυπικό ακτινογράφημα δεδομένων φάσματος σκεδαζόμενης ακτινοβολίας  $\gamma$  Am 59,54 keV ἀπὸ θείο.

12. Προκειμένου να συλλεγούν φάσματα δειγμάτων του αὐτοῦ οπτικοῦ πάχους ὅπου τούτο εἶναι δυνατόν στή θέση τοῦ σκεδαστῆ τοποθετεῖται παστίλια φαινομένης πυκνότητας στή θερμοκρασία δωματίου ἢ ἴδια με ἐκείνη τῆς ὑγρῆς φάσεως σὲ θερμοκρασία 120° C.

Τὰ δύο τμήματα τοῦ φάσματος ὑπέστησαν τὴν ἴδια ὑπολογιστικὴ διεργασία ὥστε ἡ πειραματικὴ ἀξιοπιστία νὰ προσδιοριστεῖ ἀπὸ τὴν κορυφὴ τῆς ἐλαστικῆς σκεδάσεως. Ἀπὸ αὐτὴ τὴ διεργασία συνάγεται ὅτι ἡ ὀλικὴ ἀσάφεια εἶναι 0.01 1/a.u.

Στὸ σχ. 7 ἔχουν σχεδιαστεῖ οἱ διαφορὲς τῶν φασμάτων Compton, ἀπὸ τὶς ἀλλοτροπικὲς μορφὲς τοῦ θείου πού ἀναγράφονται, μετὰ ἀπὸ κανονικοποιήσεις καὶ



Σχ. 7. Διαφορὲς φασμάτων Compton τῶν διάφορων ἀλλοτροπικῶν μορφῶν τοῦ θείου.

διορθώσεις. Περισσότερο ἀναλυτικὰ, τὰ φάσματα  $M(\omega)$  τῶν ἀλλοτροπικῶν μορφῶν τοῦ θείου ἐλήφθησαν μὲ τὸ Φασματοσκόπιο Compton πηγῆς δακτυλίου  $^{241}\text{Am}$   $1.85 \times 10^{10}\text{Bq}$ , κυρίας γραμμῆς  $\gamma$  59.54 keV, καὶ ἐνὸς ἀνιχνευτῆ στερεᾶς καταστάσεως Ge πάχους 5 mm καὶ ἐμβαδοῦ  $100\text{ mm}^2$  συνδεμένου σὲ Ἀναλύτη 4096 διαύλων. Τὸ σύστημα εἶχε ρυθμιστεῖ ὥστε ἡ διασκεδαστικὴ του ἰκανότητα νὰ εἶναι 9.6 eV/διάυλο [0.014 au ὀρμῆς/διάυλο]<sup>13</sup>. Ἡ γωνία σκεδάσεως ἦταν  $173.5^\circ \pm 0.8^\circ$  ἡ δὲ παστίλια τοῦ θείου εἶχε τοποθετηθεῖ στὸ χῶρο μεταξὺ δύο παραθύρων ἀπὸ Mylar 5  $\mu\text{m}$  ὁ ὁποῖος συγκοινωνοῦσε μὲ χῶρο ἡμικαταλειμμένο ἀπὸ θεῖο ὥστε νὰ ὑπάρχει ἡ δυνατότητα ὑπερχείλισης κατὰ τὴν τήξη. Ἡ θέρμανση τοῦ δείγματος ἦταν ἔμμεση μὲ χρῆση λουτροῦ ἐλαίου σιλικόνης, τοῦ ὁποῖου ἡ θερμοκρασία ρυθμίζεται ἔτσι ὥστε ἡ θερμοκρασία τοῦ δείγματος νὰ παραμένει σταθερὰ ἢ ἐπιθυμητῆ, καὶ μπορού-

13. 1 a.u. ὀρμῆς =  $1.99 \times 10^{17}$  kg.m]s.

σε να καταγράφεται συνεχώς. Οι επαναλαμβανόμενες σειρές μετρήσεων ακολουθούσαν την εξέως πειραματική διαδικασία: κατ' αρχάς γίνονταν μετρήσεις του φάσματος του ορθορομβικού θείου σε θερμοκρασία δωματίου, στη συνέχεια ή θερμοκρασία έμμενε σταθερή για μερικές ώρες στη θερμοκρασία  $97^{\circ}\text{C} \pm 1^{\circ}\text{C}$  ώστε τὸ δείγμα να γίνει μονοκλινές όπου και γινόταν ή λήψη του φάσματος, επακολουθοῦσε ή θέρμανση του δείγματος στους  $123^{\circ}\text{C} \pm 1.5^{\circ}\text{C}$  και ή λήψη του φάσματος του υγρού θείου· τέλος με θέρμανση στους  $163^{\circ}\text{C} \pm 2^{\circ}\text{C}$  γινόταν ή λήψη του φάσματος του πολυμερισμένου θείου. Στὸν πίνακα δίδονται οί διαφορές τῶν φασμάτων Compton  $\Delta j(q)$  για τις διάφορες άλλοτροπικές μορφές που μετρήθεισαν.

#### ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Τὰ φάσματα τὰ ὁποῖα παρατέθηκαν στὸ σχῆμα 6 εἶναι τυπικά δείγματα ἑνὸς μεγάλου ἀριθμοῦ ὁμοίων φασμάτων, ἀπὸ τὰ ὁποῖα σχηματίσθηκε ὁ πίνακας 1 ὁ ὁποῖος ἀποτελεῖ μιὰ πλήρη συλλογή πειραματικὰ δεδομένων για τὸν προσδιορισμὸ τῶν διάφορων κατανομῶν τῶν ἠλεκτρονικῶν ὀρμῶν τῶν ἠλεκτρονίων σθένους στὶς άλλοτροπικές μορφές του θείου. Για τὸ σκοπὸ αὐτὸ ἀπαιτοῦνται ὑπολογισμοί τῆς μορφῆς του φάσματος Compton οί ὁποῖοι δὲν ἔχουν γίνει μέχρι σήμερα λόγω τῆς πολυπλοκότητος τῶν δομῶν του θείου.

Ἡ θεώρηση πάντως τῆς μορφολογίας τῶν καμπυλῶν του σχήματος 6 δηλώνει τις δομές ἐκεῖνες ὅπου ὑπάρχει σαφῆς ἔντοπισμὸς τῶν ἠλεκτρονίων σθένους.

#### SUMMARY

##### **γ-Ray Compton Spectroscopy studies of Allotropic forms of sulfur. Relation between structure and electron momentum distribution.**

The Compton profile of the allotropic forms of sulfur, orthorhombic, monoclinic, liquid and polymer was measured using the Compton  $\gamma$  spectrometer with a special attachment for «*in situ*» measurements. Sulfur has been chosen in this study not only for its technological importance but mainly because it appearance in so many different structures, that makes it unique in understanding the influence of structure on the electronic structure. The spectra were obtained from samples of identical dimension and have been normalized to the elastic by structure component of  $^{241}\text{Am}$   $\gamma$ -radiation of 59.54 keV. The results indicate a similarity for the electron momentum distribution of all four phases. The Compton profile difference at the Compton peak is about 3 %.



## ΠΙΝΑΚΑΣ

Διαφορές φασμάτων Compton  $\Delta J(q)$ 

$q$ (a.u)	Όρθ-Μον	Μον-Υγρό	Υγρό-Πολ.	Όρθ-Πολ.
0.00	0.031	0.001	0.012	0.044
0.05	0.030	0.002	0.011	0.043
0.10	0.029	0.004	0.009	0.042
0.14	0.026	0.007	0.007	0.040
0.22	0.014	0.014	0.009	0.037
0.29	0.004	0.017	0.018	0.039
0.36	0.009	0.012	0.025	0.046
0.41	0.015	0.006	0.025	0.046
0.51	0.014	-0.001	0.018	0.032
0.60	0.014	0.005	0.012	0.032
0.70	0.027	0.002	0.003	0.033
0.80	0.019	0.005	0.004	0.028
0.89	0.009	0.006	0.006	0.021
0.99	0.008	0.001	0.005	0.013
1.20	0.000	0.006	-0.002	0.004
1.40	-0.002	0.012	-0.006	0.004
1.60	-0.008	0.017	-0.024	-0.015
1.80	0.001	-0.002	-0.005	-0.006
2.00	-0.007	0.003	-0.007	-0.011
2.20	0.001	0.002	-0.008	-0.006
2.40	0.001	-0.010	-0.004	-0.013
2.60	-0.006	-0.002	-0.002	-0.010
2.80	-0.002	0.003	-0.006	-0.006
3.00	0.003	-0.013	-0.003	-0.013
3.20	-0.004	-0.005	-0.006	-0.014
3.40	-0.003	-0.005	-0.003	-0.010
3.60	-0.002	-0.003	-0.012	-0.018
3.80	-0.002	-0.009	0.001	-0.010
4.00	0.001	-0.012	-0.003	-0.015
4.10	-0.002	-0.010	-0.005	-0.017
4.20	-0.004	-0.008	0.001	-0.012
4.40	0.002	-0.007	-0.007	-0.012
4.60	-0.002	-0.004	-0.003	-0.009
4.80	0.000	-0.005	-0.014	-0.019
5.00	-0.002	-0.003	-0.008	-0.013
5.20	-0.005	0.000	-0.008	-0.014
5.40	-0.004	0.000	0.000	-0.004
5.60	0.001	-0.005	-0.009	-0.012
5.80	0.000	-0.003	-0.007	-0.011
6.00	-0.003	0.000	-0.002	-0.006
6.40	-0.005	-0.004	-0.004	-0.013
6.60	-0.005	0.001	-0.004	-0.008
7.00	0.001	-0.001	-0.008	-0.008