

# “Atomi és mágneses szerkezetek neutrodiffrakciós vizsgálata” c. OTKA témapályázat (T 042495) zárójelentése (2003-2007)

## A kutatás célja

Kutatásaink fő célkitűzése különböző kristályos és üvegszerű rendszerek atomi és mágneses szerkezetvizsgálata. A pályázatban polikristályos, nanokristályos és amorf anyagok vizsgálatát céloztuk meg, főként neutrodiffrakciós technikára és a kísérleti spektrumok modellezésre támaszkodva. Kutatási célkitűzéseink sarokpontjai:

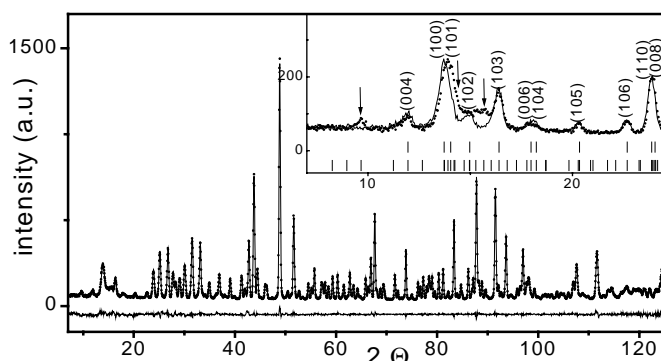
- Nanokristályos ferritek (magnetit, hexaferrit alapú oxidok és származékai) atomi és mágneses szerkezetének felderítése a Rietveld-eljárás alkalmazásával: új szimmetriacsoport, az atomi pozícióparaméterek, betöltöttségi faktorok, a mágneses alrácok, a momentumok irányának és nagyságának meghatározása. A mágneses szerkezet és a mágneses tulajdonságok közötti kapcsolat analízise.
- Nem-stöchiometrikus perovszkit típusú ionos vezetők, illetve Bi-alapú manganát-oxidok tércsoport, atomi és mágneses betöltöttségek meghatározása. Töltés-rendeződések okozta fázisátalakulások vizsgálata, és a kialakuló új szimmetria-csoportok Rietveld-analízise.
- Amorf oxid-üvegek rövidtávú rendezettségének meghatározása a diffrakciós spektrumok fordított Monte Carlo (RMC) szimulációján alapuló modellezéssel.
- Doménszerkezet vizsgálata hőkezelt amorf/nanokristályos anyagokban neutrondepolarizációval a mágneses keményedés/lágyulás mechanizmusának megértése céljából.

## A) Tudományos eredmények

### 1. Kristályos anyagok

#### 1.1. Sc-mal helyettesített báriumhexaferrit

**Bariumhexaferrit**  $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$  ( $P6_3/mmc$  tércsoport) ferrimágneses szerkezete nagymértékben módosítható kation-helyettesítéssel. A helyettesítő ionok minőségének és mennyiségének függvényében alacsony hőmérsékleten bonyolult, hosszú távon rendezett mágneses szerkezetek alakulhatnak ki. Ilyen fázisátalakulás tapasztalható Sc-mal helyettesített Ba-hexaferritek esetén is. A  $\text{BaFe}_{10,4}\text{Sc}_{1,6}\text{O}_{19}$ -ban 210 K környékén lejátszódó mágneses



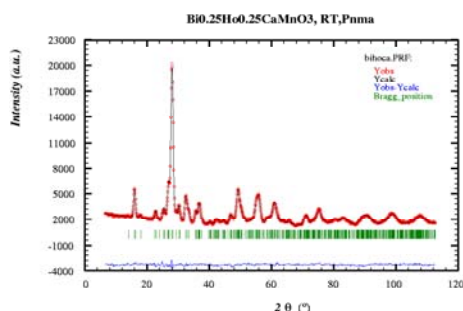
1. ábra.  $\text{BaFe}_{10,4}\text{Sc}_{1,6}\text{O}_{19}$  neutrodiffrakciós spektruma 10 K-en és Rietveld-illesztés ( $\lambda=1.2251\text{\AA}$ ). A betét ábra alacsony szórás tartományban ábrázolja a 10 és 300K-en mért spektrumokat, a nyilak a tisztán mágneses eredetű reflexiókat mutatják.

fázisátalakulást vizsgáltuk a hőmérséklet függvényében. Az átalakulás fölötti hőmérsékleten mért neutrodiffrakciós spektrumot az irodalomban jól ismert ferrimágneses Gorter-típusú mágneses szerkezettel sikeresen modelleztük. Megállapítottuk, hogy a hőmérséklet csökkentésével, - egy viszonylag széles hőmérséklettartományban (210 - 20K között) - folyamatosan kialakul egy bonyolult mágneses szerkezet. A mágneses eredetű

szatellit reflexiók szétválnak az alapreflexióktól, és mind intenzitásuk, mind a pozíciójuk változik a hőmérséklet függvényében. Modellezésünket inkommenzurábilis, kúpos mágneses szerkezet feltételezésével végeztük el. A modell  $c/2$  hosszúságú blokkokból épül fel, ahol  $c$  az elemi cella hexagonális tengely irányú rácsparamétere ( $c=23.54 \text{ \AA}$ ). A szomszédos blokkok határát a  $P6_3/mmc$  tércsoport hexagonális tengelyre merőleges tükörsíkjai képezik. Az egyes blokkokban megőrződik a mágneses momentumok magas hőmérsékleten is tapasztalt ferrimágneses jellege, azonban irányuk kitér a hexagonális tengely irányából. A szomszédos blokkok momentumai pedig  $k\pi+\pi$  szöggel fordulnak el egymáshoz képest, ahol  $k$  a mágneses szerkezet hullámvektorának nagysága. A szerkezet paramétereit a neutrondiffrakciós spektrum Rietveld-módszeren alapuló illesztésével határoztuk meg (lásd 1. ábra). A hexagonális tengellyel párhuzamos  $\mathbf{k}$  vektor hosszára  $0.236$  értéket kaptunk, ami  $98 \text{ \AA}$  periódushossznak felel meg, a kúp nyílásszögére pedig  $40^\circ$ -ot eredményezett a  $10 \text{ K}$  hőmérsékleten mért neutrondiffrakciós spektrum kiértékelése. A periódushossz a hőmérséklet függvényében folyamatosan változik. Megállapítottuk, hogy a Sc szelektív beépülése a szerkezet  $5$  vas alrácába az alrácok átlagos mágneses momentumainak jelentős csökkenését eredményezi.

## 1.2. Bi-alapú mangánoxid perovszkitok

**A Bi-alapú mangánátok** sok érdekes, az irodalomban ezideig nem tisztázott fázisátalakulást mutatnak. Célunk, a töltésrendeződés okozta rácsstorzulás - kristály-szimmetriaváltozások - és a lehetséges töltés-és mágneses rendeződés analízise volt a hőmérséklet függvényében. Első lépésben a  $\text{Bi}_{0.25}\text{Ho}_{0.25}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$  és  $\text{Bi}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$  (az utóbbi referencia mintaként szerepel) vizsgáltuk. Neutrondiffrakciós méréseket végeztünk  $300 \text{ K}$  és  $10 \text{ K}$  hőmérsékleteken, a kiértékelést Rietveld-módszerrel végeztük. Megállapítottuk, hogy  $300\text{K}$ -en a  $\text{Bi}_{0.25}\text{Ho}_{0.25}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$  paramágneses, míg alacsony hőmérsékleten a  $\text{Mn}^{3+}/\text{Mn}^{4+}$  töltés-rendezett állapotra jellemző antiferromágneses rend alakul ki. A kristályrác szobahőmérsékleten (lásd 2. ábra) ortorombos  $Pnma$  tércsoportban indexelhető (bár gyenge



2. ábra.  $\text{Bi}_{0.25}\text{Ho}_{0.25}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$  neutrondiffrakciós spektruma ( $\lambda=1.069 \text{ \AA}$ ,  $300\text{K}$ ) és Rietveld-illesztés

monoklin torzulás megfigyelhető), amely átalakul monoklin szimmetriájú  $P2_1/m$  tércsoporttal leírható szerkezetbe alacsony hőmérsékleten. Meghatároztuk a szerkezetet jellemző kristallográfiai paramétereit.

A  $\text{Fe}^{3+}$  helyettesítés hatását vizsgáltuk a  $\text{Bi}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}\text{O}_3$  ( $0 < x \leq 0.6$ ) összetételekre. Neutrondiffrakciós méréseinkből megállapítottuk, hogy szobahőmérsékleten a kristályrác ortorombos  $Pnma$  tércsoportban indexelhető. Alacsony hőmérsékleten a  $0.05 \leq x \leq 0.2$  koncentrációtartományban az elemi cella

lényegében változatlan, ami a  $\text{Fe}^{3+}$  és  $\text{Mn}^{3+}$  ionsugarak hasonló méretének tulajdonítható. Növekvő Fe-koncentráció függvényében a kristályrác, és azon belül  $\text{MnO}_6$  oktaéder torzulást szenved. A mágneses szórás jellege arra utal, hogy alacsony Fe-koncentrációnál ( $x=0.2$ ) antiferromágnesesen csatolt, Fe-ban dús szigetek vannak jelen a ferromágneses környezetben. Nagyobb Fe-koncentrációnál az antiferromágneses Fe-Mn csatolás dominálja a ferromágneses csatolást, és  $x=0.5, 0.6$  koncentrációknál az antiferromágneses rendeződés már szobahőmérsékleten is megfigyelhető.

A  $\text{Bi}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{Fe}_x\text{Mn}_{(1-x)}\text{O}_3$  ( $x=0, 0.1, 0.2, 0.6, 1$ ) rendszeren  $300\text{K}$ -en végzett neutrondiffrakciós méréseinkből megállapítottuk, hogy a növekvő Fe helyettesítés hatására a

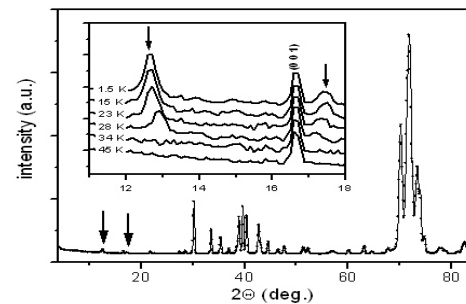
kristálytani szimmetria-átalakulás történik. Az ortorombos Pnma tércsoportból ( $x=0, 0.1$  és  $0.2$ ) a tetragonális R-3c ( $x=0.6$ ) keresztül átalakul a köbös Pm3m tércsoportba ( $x=1$ ).

Megállapítottuk, hogy a  $Bi_{0.25}Tm_{0.25}Ca_{0.50}Mn_{1-x}Fe_xO_3$  ( $x=0, 0.1, 0.5$ ) kristályszerkezete jól modellezhető a Pnma tércsoportban. A Tm helyettesítés kis mértékű anizotróp ráctorzulást okoz, és az elemi cella méretét csökkenti. Ugyanakkor a Mn-O kötéstávolság megnövekszik, feltehetően azért, mert az oktaéder tágul a bázis síkban. A Fe-dópolás destabilizálja a Jahn-Teller torzulást, ami egy szimmetrikusabb ortorombos matrix kialakulását és antiferromágneses kicserélődést eredményez.

A szemcse méret hatását tanulmányoztuk, összehasonlítva a  $La_{0.6}Sr_{0.4}MnO_3$  nanoszemcsés (15 nm) és mikrokristályos referencia mintákat. Megállapítottuk, hogy a nanoszemcsés minta az R-3c szimmetriát mutatja és kommenzurábilis kollineáris ferromágnes, hasonlóan a mikrokristályoshoz. Az átlagos atomi mágneses momentuma kb. 20%-kal kisebb, mint a mikroszemcsés mintáé. A MnO6 oktaéderek nem mutatnak torzulást.

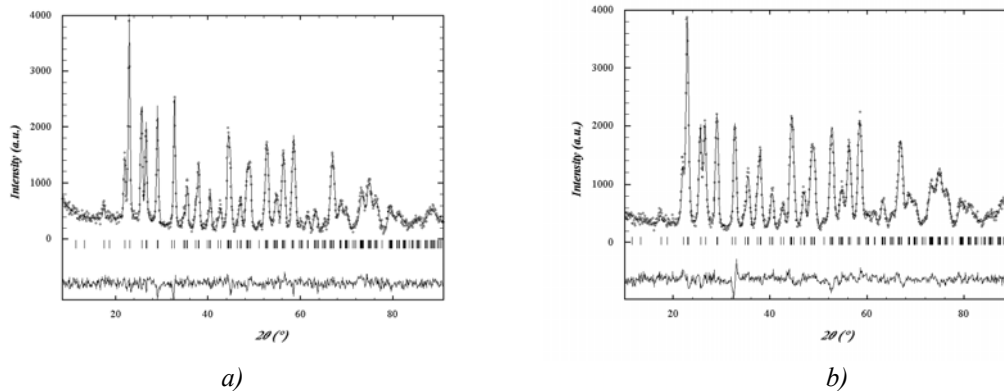
### 1.3. $FeAl_2$ mágneses ötvözet

A  $FeAl_2$  anomális mágneses viselkedését vizsgáltuk neutrondiffrakcióval. Alacsony hőmérsékleten, 34 K alatt kis intenzitású mágneses eredetű reflexiók megjelenését tapasztaltuk, amelyek félértékessége közel azonos a nukleáris Bragg-csúcsokéval. Ez egyértelműen arra utal, hogy hosszú távon rendezett mágneses szerkezet van jelen, ellentétben az irodalomban közölt spinüveg állapottal. Megállapítottuk, hogy a nukleáris Bragg-csúcsokon nem jelenik meg mágneses járulékok alacsony hőmérsékleten, és a tisztán mágneses eredetű két szuperreflexió helye ellentétes irányban tolódik el a hőmérséklet függvényében, ami azok szatellit jellegére utal (lásd 3. ábra). Ebből a mágneses szerkezet inkommenzurábilis jellegére lehet következtetni, a periódushosszra 11 Å adódott. Az atomi mágneses momentumok átlagos nagyságára 0.3-0.5  $\mu_B$  értéket kaptunk, ellentétben a spinüveg állapotra közölt 2  $\mu_B$  körüli irodalmi értékkel.



3. ábra.  $FeAl_2$  neutrondiffrakciós spektruma 1.5K-en ( $\lambda=2.4266$  Å), és a mágneses szatellit reflexiók hőmérsékletfüggése 1.5-45 K tartományban..

1.4. A ritkaföldfém helyettesítésű ittrium-aluminium-borát  $YAl_3(BO_3)_4$  {YAB} kristályok nemlineáris optikai tulajdonságai révén ígéretes optikai eszközök alapjait képezik. Munkánk célja, az Er illetve Yb dópolás hatásának vizsgálata a YAB szerkezetére. A {YAB}, {Er(12 és 50%):YAB} és {Yb(50%):YAB} összetételű minták neutrondiffrakciós vizsgálatából megállapítottuk, hogy a dópolás hatására a kristályszimmetria nem változik, a szerkezet a trigonális szimmetriájú hexagonális R32 (No. 155) tércsoportban indexelhető. Az irodalom alapján kérdéses volt, hogy az  $Er^{3+}$  az Y- vagy az Al-helyeket preferálja-e? Megállapítottuk, hogy az  $Er^{3+}$  az Y-pozíciót foglalja el. A 12at% Er helyettesítés hatására a YAB szerkezeti paraméterei (rácsállandó, atomi pozíció-paraméterek) mérési hibán belül nem változnak meg, míg az 50at%Er ill. Yb dópolás szignifikáns változást okoznak a rácsállandóban és az atomtávolságokban egyaránt. Az illesztés eredményét a 4. ábra szemlélteti.



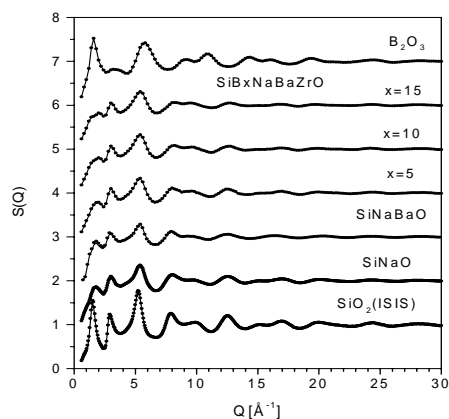
4. ábra. Neutrodiffrakciós spektrum ( $\lambda=1.069 \text{ \AA}$ ) és Rietveld-illesztés: a)  $Y_{0.88}Er_{0.12}Al_3(BO_3)_4$ ; b)  $Y_{0.5}Yb_{0.5}Al_3(BO_3)_4$

## 2. Natriumborosilikát oxidüvegek szerkezete

A nátrumborosilikát alapú üvegek vizsgálata napjainkban fontos kutatási terület, mivel az egyik legalkalmasabb anyag a radioaktív hulladékok pl. urán tartalmú fűtőelemek valamint plutoniumoxidok biztonságos tárolására. Célunk, olyan stabil szerkezetű mátrix-üvegek előállítása volt, melyek alkalmasak erre a feladatra. Az oxidüvegek rövid távú szerkezete viszonylag jól definiált, a hálószerkezetet a kovalens kötésű szerkezeti egységek egymáshoz való kapcsolódása alkotja. A termikus illetve szerkezeti tulajdonságainak ismerete nélkülözhetetlen, de az alkotó elemek nagy száma (5-8 komponens) miatt a szerkezet pontos felderítése nehéz feladat.

Szisztematikus mintasorozatot készítettünk, kiindulva a minél egyszerűbb összetételből  $B_2O_3$ ,  $70SiO_2 \cdot 30Na_2O$  (mol%), egészen a 5-komponensű mátrix-üvegig ( $65-x$ )  $SiO_2 \cdot xB_2O_3 \cdot 25Na_2O \cdot 5BaO \cdot 5ZrO_2$  ( $x=5, 10, 15$  mol%), majd pedig  $UO_3$  illetve  $CeO_2$  -ot adalékoltunk a mátrix-üveghez ( $CeO_2$  a radioaktív  $PuO_2$  modellezését szolgálta). A mintákat *B-11* izotópból készítettük, hogy a természetes bór nagy neutronabszorpciójából adódó kiértékelési problémákat elkerüljük.

Megállapítottuk, hogy a minták jelentős része nagy mértékben abszorbeálja a vizet normál körülmények között tárolva. Megfelelő hőkezeléssel, vákuumszívás mellett ( $150 \text{ °C}$ -on 5órán keresztül) sikerült kiszárítani, és neutrodiffrakciós mérésekre alkalmassá tenni a mintákat (a hidrogén nagy inkohérens szórása értékelhetlenné teszi a koherens szórásból származó járulékot).



5. ábra. Neutrodiffrakciós szerkezeti függvények: mérés (pontok) és RMC-illesztés (folytonos vonal)

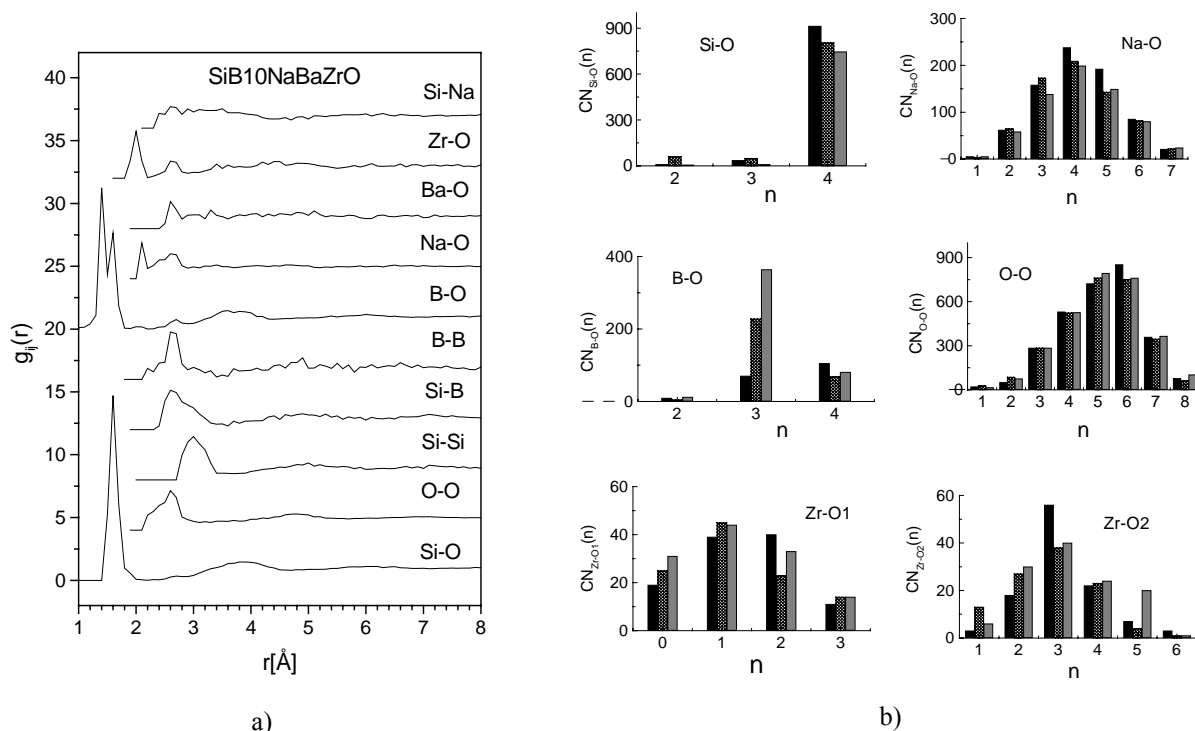
A kísérleti  $S(Q)$  szerkezeti függvényt - lehetőség szerint - nagy  $Q$ -tartományig megmértük a megfelelő  $r$ -térbeli felbontás eléréséhez ( $\Delta r=2\pi/Q_{\max}$ ), ami szükséges a szerkezet tanulmányozásához.

Adatfeldolgozáshoz a hagyományos direkt Fourier-transzformációs technikát és a fordított Monte Carlo (RMC) szimulációs módszert alkalmaztuk. Az RMC hatékony eljárás a 3-dimenziós részecskekonfiguráció modellezésére, bár a mi esetünkben nagyon sok komponensű üvegről van szó. Az 5. ábra mutatja a mintasorozat kísérleti és az RMC-vel nyert szerkezeti függvényeit.

Legfontosabb eredményeink az alábbiakban foglalhatóak össze:

- A **70SiO<sub>2</sub>·30Na<sub>2</sub>O** összetételű natriumszilikát üveg kombinált neutron ( $Q_{\max}=35 \text{ \AA}^{-1}$ )- és röntgendiffrakciós ( $Q_{\max}=25 \text{ \AA}^{-1}$ ) mérések RMC szimulációjával meghatároztuk - az irodalomban ezideig közlteknel pontosabban - a 6 parciális atomi párkorrelációs függvényt:  $g_{\text{SiO}}(r)$ ,  $g_{\text{OO}}(r)$ ,  $g_{\text{SiSi}}(r)$ ,  $g_{\text{NaO}}(r)$ ,  $g_{\text{SiNa}}(r)$  és  $g_{\text{NaNa}}(r)$ . Megadtuk az elsőszomszéd távolságokat, a koordinációs számokat, a 3-részecske szögeloszlás-függvényeket, valamint a kovalens kötésekben álló Si-O hálószerkezetet alkotó gyűrűk eloszlását és azok átlagos méretét. Legfontosabb megállapításaink, hogy az oxigén atomok 63%-a vesz részt a SiO<sub>4</sub> tetraéderek egymáshoz való kötésében, míg 37%-a terminális, azaz a Si-O lánc megszakad és az oxigén Na ionhoz (is) kötődik. Az irodalom alapján a Na atomok környezete viszonylag kevésbé ismert, amihez sikerült a korábbinál nagyobb pontosságú szerkezeti paramétereket rendelni. Megállapítottuk, hogy a Na-O kötéstávolság 2.29 Å, és a koordinációs szám 2.5 a {2.05-2.6 Å} tartományban számolva. A Na-Na távolság 2.6 Å, ami jóval kisebb, mint az irodalomban közölt molekula dinamikai modellezéssel számolt értékek. Azt találtuk, hogy két szomszédos Na ion szeret egy adott O atom környezetében lenni.

- Az 5-komponensű **(65-x)SiO<sub>2</sub>·xB<sub>2</sub>O<sub>3</sub>·25Na<sub>2</sub>O·5BaO·5ZrO<sub>2</sub>**  $x=5, 10, 15 \text{ mol\%}$  mátrix-üveg neutrodiffrakciós méréséből ( $Q_{\max}=30 \text{ \AA}^{-1}$ ) meghatároztuk a szerkezetet jellemző legfontosabb atompárok parciális eloszlásfüggvényeit (lásd 6/a ábra), az atomi elsőszomszéd távolságokat, a koordinációs számeloszlásokat (lásd 6/b ábra).



6. ábra. Nátriumboroszilikát neutrodiffrakciós méréséből RMC szimulációval kapott  
a) parciális párkorrelációs függvények b) koordinációs szám eloszlások a három különböző összetételű mintára (B5-fekete, B10-srafozott, B15-szürke)

Megállapítottuk, hogy a mátrix-üveg szerkezeti felépítésében elsősorban a tetraéderez koordináltságú (SiO<sub>4</sub>)<sup>4-</sup> egységek játszanak fontos szerepet, míg a bór 3-as és 4-es koordináltságú oxigén környezetekben helyezkedik el.

Az egyik legérdekesebb eredményünk, hogy a B-O eloszlásra két karakterisztikus elsőszomszéd távolságot kaptunk 1.40 Å illetve 1.60 Å-nél. Mivel az utóbbi egybeesik a tetraéderez

koordinációjú Si-O távolsággal, feltételezzük, hogy a bór egy része beépül a Si-alapú hálószerkezetbe, és  $^{13}\text{B-O-}^{14}\text{Si}$  illetve  $^{14}\text{B-O-}^{14}\text{Si}$  vegyes láncok alakulnak ki.

- Megállapítottuk, hogy az uránoxid ( $\text{UO}_3$ , 30s% ) bevitelle stabilizálja az üveg szerkezetét: kevésbé hajlamos a kristályosodásra, mint az urán nélküli mátrix-üveg, és a higroszkopikus tulajdonságai is kedvezőbbek. A  $Q_{\text{max}}=10 \text{ \AA}^{-1}$ -ig végzett neutrondiffrakciós méréseink RMC szimulációval kapott eredmények konzisztensek egy olyan 3-dimenziós atomi konfigurációs modellel, ahol az U-ionok a borszilikát alapú mátrix intersticiális üregeiben foglalnak helyet, lényegében változatlanul hagyva a mátrix-üveg szerkezetét. Az U-O atomi parciális korrelációs függvény éles elsőszomszéd eloszlást mutat  $1.7 \text{ \AA}$  környékén, és további csúcsok jelennek meg  $2.8$ ,  $3.6$  és  $4.1 \text{ \AA}$  -nél. Az  $\text{U}^{6+}$  ionokat 6 oxigén koordinálja az  $1.6$ - $3.4 \text{ \AA}$  intervallumban. A szerkezet további részleteinek felderítésére nagy Q-tartományig szükséges neutron- és röntgendiffrakciós méréseket végezni.

- Azt találtuk, hogy a cériumoxid ( $\text{CeO}_2$ , 10s%) kristályosító hatású, de 3mol%-nál nagyobb mennyiségű  $\text{ZrO}_2$  adalékolásával sikerült stabilizálni az üvegszerkezetet, és 5mol%  $\text{ZrO}_2$  hozzáadásával a hálószerkezet stabilnak tekinthető. Megállapítottuk, hogy a hálószerkezet jellemzői megegyeznek a befogadó üveg szerkezeti paramétereivel, a Ce atom képes beépülni egy jól meghatározott és igen bonyolult üvegrendszerbe, anélkül hogy az alapszerkezetet megváltoztatná, ami arra ad reményt, hogy a Pu atom is képes lesz beépülni egy hasonló szerkezetbe.

- Megállapítottuk, hogy a Zr-O párkorrelációs függvény nagyon éles csúcsot mutat  $2.0 \text{ \AA}$  -nél (lásd 6. ábra) amihez  $1.2$  átlagos koordinációs szám tartozik, míg  $2.6 \text{ \AA}$  -nál kisebb intenzitású széles csúcs jelenik meg 2 további oxigén szomszéddal. Ebből arra a következtetésre jutottunk, hogy a Zr üvegeképző szerepet is betölt a töltéskompenzáló szerepe mellett (megjegyezzük, hogy a Zr modifikáló avagy üvegeképző szerepe vitatott az irodalomban).

### 3. Neutrondepolarizációs vizsgálatok

A FINEMET  $\text{Fe}_{73.5}\text{Si}_{13.5}\text{B}_9\text{Nb}_3\text{Cu}_1$  ötvözet kitűnő lágy mágneses tulajdonságai miatt nagy gyakorlati jelentőséggel bír. Nanoszerkezete az amorf prekursor anyag megfelelő hőkezelése után a maradó amorf mátrixba ágyazódott nanokristályokból áll. Egyedi mágneses jellemzőit az amorf és nanokristályos fázisok közti mágneses kölcsönhatások eredményezik. A makromágneses tulajdonságokkal szoros összefüggésben levő mágneses domének térfogati (bulk) szerkezete vizsgálatának egyedülállóan alkalmas módszere a 3-dimenziós neutrondepolarizáció. Vizsgálataink célja a doménszerkezet alakulásának megfigyelése volt a külső mágneses tér ( $0$ - $24 \text{ A/cm}$ ) és a hőmérséklet ( $300$ - $623 \text{ K}$ ) függvényében. Megállapítottuk, hogy a mintákban telítetlen állapotban jelenlevő domének mágnesezettség vektorai a hőkezelés során alkalmazott feszültség irányára merőleges síkban vannak, és mérési eredményeink egyértelműen kimutatták a szalag síkjára merőleges mágnesezettség komponensű domének létét. A szalagot különböző transzmissziós irányokban vizsgálva tanulmányoztuk a domének elrendeződését és átlagos méretüket. A méréseket három eltérő jellegű, egymást a minta  $25 \text{ \mu m}$ -es vastagsága mentén követő réteg feltételezésével illesztettük, melyek közül a két szélső mágnesezettsége – a magnetosztatikusságot minimalizálандó – a minta síkjában volt. A modell paramétereinek illesztésével meghatároztuk a minta mágneses textúráját és a domén-modell geometriai paramétereit. Eredményeink összhangban vannak a felületi doménszerkezetről készített Bitter-ábrákkal.

## ***B) Műszerfejlesztések***

A kutatóreaktor termikus csatornájánál működő 'PSD' neutrondiffraktométeren jelentős fejlesztést valósítottunk meg ebben az OTKA pályázati periódusban. Új helyzetérzékeny detektorrendszert vásároltunk, és annak üzembe helyezéssel egyidejűleg a nagyberendezés vezérlő-, mérő-, és adatgyűjtő rendszerét is modernizáltuk. A korábbi DOS-alapú programot Windows alapú (saját fejlesztésű) felhasználóbarát szoftverrel váltottuk ki. A beruházást nagyrészt OM és EU forrásokból valósítottuk meg, de kisebb egységeket ebből az OTKA pályázatból finanszíroztunk. Egy további fontos felújítást végeztünk el 2007 évben; az 1993 óta működő motorvezérlő- és meghajtó elektronikát modern elemekből felépülő új elektronikával váltottuk ki.

A 'PSD' berendezésért felelős kutató ezen OTKA témavezetője.

## ***C) Metodikai háttér***

***Mérések*** - Méréseinket a Budapesti Kutatóreaktor melletti 'PSD' neutrondiffraktométeren végeztük. A mérőberendezés működtetésének pénzügyi háttérét részben ebből az OTKA forrásból fedeztük, másrészt EU-NMI3 forrásból. A kristályos mintákon végzett itthoni méréseinket kiegészítettük LLB/Saclay-i neutrondiffrakciós mérésekkel is (3T2 ill. G4-1 spektrométereken). Az üvegmintákon végzett itthoni méréseinket kiegészítettük a Los Alamos-i 'NPDF' spektrométeren nagy Q-tartományig végzett neutrondiffrakciós mérésekkel. A neutrondepolarizációs méréseket Delft/Hollandia végeztük

***Mintaelőállítás*** - A hexaferrit illetve manganát mintákat Bulgáriában készítették a témában együttműködő csoportban (Prof. Kiril Krezhov). Az oxidüveg mintákat Fábián Margit PhD hallgató készítette a kolozsvári Babes-Bolyai Egyetemen a témában együttműködő csoportban (Dr. Veress Erzsébet).

A  $\text{FeAl}_2$  ötvözetet Vincze Imre (MTA SZFKI) csoportjában, míg a dópolt *YAB* kristályokat Beregi Jelena (MTA SZFKI) növesztette, és az ő kutatásaikhoz kapcsolódtunk. A FINEMET szalag alakú mintákat Varga Lajos (MTA SZFKI) állította elő, a Bitter-ábrákat Beke Dezső (Debreceni Tud. Egyetem) csoportjában készítették.