

ЛОКАЛИЗОВАННОЕ СОСТОЯНИЕ ПОЗИТРОНА В ПРОСТЫХ МЕТАЛЛАХ

О.М.Гольтяев, В.М.Осадчиев, С.Г.Поздняков

Показано, что энергетически выгодным состоянием позитрона в металле является новое состояние – нейтральное образование конечного размера. Этот факт не противоречит экспериментальным данным по времени жизни позитрона и угловому распределению аннигиляционных квантов.

Согласно принятому взгляду, в металле быстрый позитрон термализуется за время (10^{-11} с) много меньшее его времени жизни в металле ($\tau \sim 10^{-10}$ с). Аннигиляция происходит в состоянии с кинетической энергией поступательного движения позитрона равной нулю. В основе существующих представлений лежит предположение о делокализованном состоянии позитрона ¹⁻³. В рамках однородной модели металла (модель "желе") делокализованному позитрону приписывают волновую функцию $\psi^+(r) = 1/\sqrt{V} = \text{const}$. При учете кристал-

лической структуры позитрон описывают функцией блоховского типа, соответствующей минимальной энергии зоны.

Однако, делокализованное состояние не удовлетворяет принципу минимума энергии системы позитрон – металл. Позитрону оказывается энергетически выгодным образовать локализованное состояние, экранированное электронной шубой единичного заряда. Образование нейтральной квазичастицы (псевдопозитрония PPs) с характерным размером R происходит в результате конкуренции выигрыша в кулоновской энергии взаимодействия позитрона с шубой ($-1/R$) и проигрыша за счет увеличения кинетической энергии позитрона, локализованного в яме ($1/R^2$). Размер PPs определяется параметром плотности электронной жидкости $R \sim r_s \sim 1/p_F$. Формирование PPs начинается еще до термализации при скоростях позитрона порядка скоростей электронов. Условие образования квазичастицы за время жизни позитрона заведомо выполнено $\tau (p_F/m) \gg r_s$. В делокализованном состоянии позитрон не возмущает электронную плотность (ρ_0), а для удовлетворения условия нейтральности необходимо принять, что одновременно с позитроном в объеме появляется электрон, который приходит с поверхности металла и находится в состоянии с энергией Ферми ϵ_F .

Локализованное состояние позитрона отличается от известных автолокализованных состояний (например, пузырьков в He, поляронов⁴), для которых характерно обязательное участие системы атомов и ее деформации. Заряд автолокализованного состояния не экранируется, а масса может достигать значений нескольких масс атомов. Нейтральный PPs образуется за счет деформации электронной жидкости, масса PPs не превышает двух электронных масс.

Энергию псевдопозитрония можно рассчитать в рамках однородной модели. Электронные состояния находятся в результате самосогласованного решения нелинейных уравнений Хартри – Фока при фиксированном распределении плотности заряда позитрона $\rho_+ = |\psi_\mu^+|^2$. Волновая функция позитрона задается с помощью вариационных параметров $\{\mu\}$, значения которых определяются из требования минимума полной энергии системы. Разница энергий систем с позитроном в локализованном (\hat{E}_μ) и делокализованном ($E_0 + \epsilon_F$) состояниях в приближении Хартри – Фока (HF) равна:

$$\omega_\mu = [(\hat{T}\tilde{\rho}) - (\hat{T}\rho_0) - \epsilon_F] + \frac{1}{2} (\delta\rho | Q | \delta\rho) - (\delta\rho | Q | \rho_+) + (\hat{T}\rho_+), \quad (1)$$

где Q – интеграл Пуассона, $(\hat{T}\rho_+)$ – кинетическая энергия позитрона, заряд электронной шубы $\delta\rho = \tilde{\rho} - \rho_0$ ($\int \rho_+ d^3r = \int \delta\rho d^3r = 1$). Наиболее простой вид нормированной функции ψ_μ^+ , удовлетворяющей условиям для волновой функции 1s-симметрии в случае несингулярного потенциала, задается одним вариационным параметром

$$\psi_\mu^+(r) = \left(\frac{2\mu^3}{\pi^4} \frac{1}{\text{ch}\mu r} \right)^{1/2}; \quad (\hat{T}\rho_+) = \frac{\mu^2}{16} \left(1 + \frac{8}{\pi^2} \right). \quad (2)$$

Значения μ_0 , ω_0 , соответствующие минимуму энергии, приведены в таблице ($e = m = \hbar = 1$). Учет обменного взаимодействия электронов слабо меняет результаты. Пример распределения плотности зарядов позитрона ρ_+ и электронной шубы $\delta\rho$ показан на рис. 1. Результаты проведенных расчетов по методу Томаса – Ферми (TF) с точностью 30% совпадают с расчетами по методу Хартри – Фока. Образование локализованного состояния выгодно во всем диапазоне металлических плотностей.

Оценим влияние решетки на PPs. Как показывают численные расчеты взаимодействие PPs с нейтральным зарядом элементарной ячейки реальных простых металлов $\Delta\omega_{\mu I} = (\rho_+ - \delta\rho | Q | \sum \delta(r - r_i) - \rho_0)$ отрицательно и мало (-10^{-3}). Аналогичная величина для делокализованного состояния позитрона равна нулю. Оценка $\Delta\omega_{\mu I}$ по модели Вигнера –

Зейтца, дает также отрицательное значение ($-0,05$), т. е. решетка способствует образованию локализованного состояния. Минимизируя выражение для энергии $\omega_{\mu} + \Delta\omega_{\mu I}$, получаем новое значение равновесного параметра $(\mu_{0I} - \mu_0)/\mu_0 \approx -0,1$, что соответствует небольшому уширению PP в решетке.

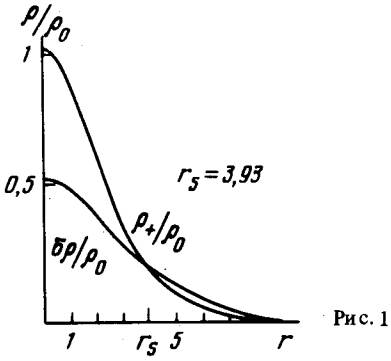


Рис. 1

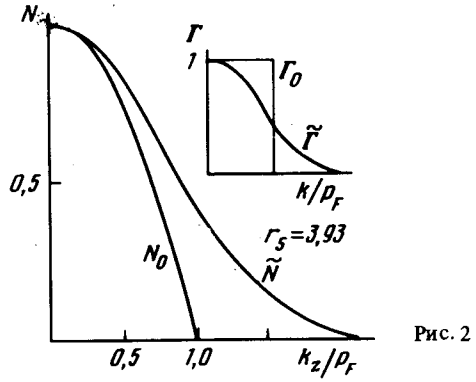


Рис. 2

Эффективное увеличение плотности электронов вблизи позитрона приводит к возрастанию скорости аннигиляции локализованного состояния ($\tilde{\lambda}$) по сравнению с аннигиляцией делокализованного состояния (λ_0)

$$\eta = \frac{\tilde{\lambda}}{\lambda_0} = 1 + \frac{1}{\rho_0} \int d^3r \delta\rho(r) \rho_+(r). \quad (3)$$

Фактор локализации η (см. табл.) является дополнительным к известному фактору усиления $\epsilon^{2,3}$, происхождение которого связано с сильной корреляцией аннигилирующих позитрона и электрона при малых относительных скоростях v (параметр $e^2/\hbar v \sim 1$). Фактор локализации практически убирает расхождение теории и эксперимента по времени жизни позитрона в простых (щелочных) металлах. В модели делокализованного состояния расхождение приписывается вкладу от аннигиляции позитрона с валентными электронами ионов без регулярных количественных оценок ².

r_s	μ_0^{HF}	ω_0^{HF}	ω_0^{IF}	η
2,07 (Al)	0,65	-0,046	-0,050	1,1
3,93 (Na)	0,62	-0,044	-0,047	1,2
4,86 (K)	0,58	-0,043	-0,046	1,3

Образование локализованного состояния не противоречит данным по угловому распределению аннигиляционных квантов. Угловое распределение связано с величиной ¹⁻³

$$N(k_z) \sim \int dk_x dk_y \Gamma(\mathbf{k}) \quad (4)$$

$$\Gamma(\mathbf{k}) \sim \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon g(\epsilon) \left| \int d^3r \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \psi^+(r) \varphi_{\epsilon}(r) \right|^2,$$

где $g(\epsilon)$ — плотность электронных состояний. Локализованное и делокализованное состояния позитрона приводят к различным зависимостям $\tilde{\Gamma}$, $\tilde{\Gamma}_0$ и \tilde{N} , N_0 (рис. 2). На опыте наблюдается, а из представлений о локализованном состоянии следует плавная зависимость $N(k_z)$. Модель делокализованного состояния (с учетом аннигиляции на остовных электронах) дает излом при $k_z = p_F$.

Приведенные численные оценки являются полуколичественными. Эффекты запаздывания и нелокальности могут привести к отличию собственно-энергетической части в точной постановке задачи в рамках ТКФС ⁵ от самосогласованного поля Хартри — Фока и изменить

энергию связи и размер псевдопозитрония. Особенности строения и взаимодействия псевдопозитрония с решеткой должны проявиться в диффузии позитрона в металле с учетом захвата в вакансии, а также при выходе позитрона на поверхность.

Авторы благодарны В.И.Гольданскому, А.Б.Мигдалу и М.А.Троицкому за обсуждение работы и замечания.

Литература

1. *Гольданский В.И.* Физическая химия позитрона и позитрония. М.: Наука, 1968.
2. *West R.N.* *Advanc. Phys.*, 1973, **22**, 263.
3. *Positrons in Solids*, Ed. Hautajarvi P., Springer – Verlag, 1979.
4. *Храпак А.Т., Якубов И.Т.* УФН, 1979, **129**, 45.
5. *Мигдал А.Б.* Теория конечных ферми-систем и свойства атомных ядер, М.: Наука, 1965.

Московский
инженерно-физический институт

Поступила в редакцию
2 декабря 1982 г.