

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Національний університет «Запорізька політехніка»

Факультет радіоелектроніки та телекомунікацій
(повне найменування інституту, факультету)

Кафедра мікро- та наноелектроніки
(повне найменування кафедри)

Пояснювальна записка
до магістерської роботи
магістр
(ступінь вищої освіти)

на тему Розрахунок енергії зв'язку і часу життя позитрона, локалізованого
у вакансії металу

Виконав: студент ІІ курсу, групи РТ-311М

Спеціальності 153 Мікро- та наносистемна техніка
(код і найменування спеціальності)

Освітня програма (спеціалізація)
Мікро- та наноелектронні прилади і пристрої

Іваницький І.С..

(прізвище та ініціали)

Керівник

Погосов В.В.

(прізвище та ініціали)

Рецензент

Сніжной В.Л..

(прізвище та ініціали)

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Національний університет «Запорізька політехніка»
(повне найменування закладу вищої освіти)

Інститут, факультет ФРЕТ

Кафедра Кафедра мікро- та наноелектроніки

Ступінь вищої освіти магістр

Спеціальність 153 Мікро- та наносистемна техніка

(код і найменування)

Освітня програма (спеціалізація) Мікро- та наноелектронні прилади і пристрої
(назва освітньої програми (спеціалізації))

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри

Генадій СНИЖНОЙ

« 12 » 12 2022 року

З А В Д А Н Н Я
НА ДИПЛОМНИЙ ПРОЄКТ (РОБОТУ) СТУДЕНТА

Іваницького Івана Сергійовича

(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема проєкту (роботи) Розрахунок енергії зв'язку і часу життя позитрона, локалізованого у вакансії металу

керівник проєкту (роботи) Погосов Валентин Вальтерович, д. ф.-м. н., професор

(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

затверджені наказом закладу вищої освіти від « 21 » листопада 2022 року № 393

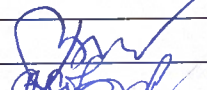
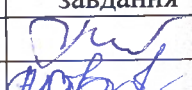
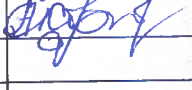
2. Строк подання студентом проєкту (роботи) 10.12.2022

3. Вихідні дані до проєкту (роботи) рекомендована література,

4. Зміст розрахунково-пояснювальної записки (перелік питань, які потрібно розробити)
Розрахувати енергію утворення вакансії, роботу виходу позитрона та позитронія з напівскінченного металу, енергію зв'язку позитрона у вакансії та час його життя

5. Перелік графічного матеріалу (з точним зазначенням обов'язкових креслень)

6. Консультанти розділів проєкту (роботи)

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	прийняв виконане завдання
1-3	Погосов В.В., професор каф. МіНЕ		
Нормоконтроль	Коротун А.В., доц. каф. МіНЕ		

7. Дата видачі завдання « _____ » _____ 20__ року.

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

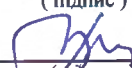
№ з/п	Назва етапів дипломного проєкту (роботи)	Строк виконання етапів проєкту (роботи)	Примітка
1	Збір і аналіз інформації	30.09.22 – 10.10.22	виконано
2	Систематизація літературних даних	11.10.22 – 16.10.22	виконано
3	Складання і затвердження наукового завдання	17.10.22 – 21.10.22	виконано
4	Формування та уточнення наукового завдання	22.10.22 – 26.10.22	виконано
5	Розрахункова робота	27.10.22 – 14.11.22	виконано
6	Аналіз розрахункової роботи	15.11.22 – 26.11.22	виконано
9	Оформлення ПЗ	27.12.22 – 12.12.22	виконано

Студент


(підпис)

Іван Іваницький
(прізвище та ініціали)

Керівник проєкту (роботи)


(підпис)

Валентин ПОГОСОВ
(прізвище та ініціал)

АНОТАЦІЯ

ПЗ: 49 с., 4 рис., 2 табл., 2 додатки, 20 джерел.

Мета роботи: Розрахувати енергію утворення вакансії, роботу виходу позитрона та позитронія з напівскінченного металу, енергію зв'язку позитрона у вакансії та час його життя.

Об'єкт дослідження: метал який містить вакансії, анігіляція позитронів

Методи дослідження: метод функціоналу густини електронного газу

Результати: У роботі розроблено методику розрахунку енергії зв'язку та часу життя позитрону у вакансії металу. Отримані результати якісно погоджуються з експериментальними даними. Виявилось, що робота виходу локалізованого позитрона може змінювати знак у порівнянні з вільним позитроном у металі.

Рекомендації щодо впровадження: дослідження є корисним для позитронної діагностики дефектів у конденсованих середовищах.

Практична цінність:._Проведені дослідження можуть пояснити деякі аномалії у зворотній емісії позитронів, як ефект приповерхневих вакансій у металів

ЕНЕРГІЯ УТВОРЕННЯ ВАКАНСІЇ, ТОЧКОВІ ДЕФЕКТИ, ПРАВИЛО ФРЕНКЕЛЯ-ЛЕНГМЮРА, МЕТОД ФУНКЦІОНАЛУ ГУСТИНИ, КОМІРКА ВІГНЕРА-ЗЕЙТСА, РОБОТА ВИХОДУ, ПОВЕРХНЕВА ЕНЕРГІЯ, ПОВЕРХНЕВИЙ НАТЯГ НАНОКРАПЕЛЬОК, ОБ'ЄМНА ГУСТИНА ЕНЕРГІЇ

ЗМІСТ

Перелік умовних скорочень, позначень, символів, термінів.....	7
Вступ.....	8
1. Літературний огляд. Основні характеристики вакансії.....	10
1.1 Основні відомості про точкові дефекти.....	10
1.2 Енергія утворення вакансії.....	13
1.3 Електрони та позитрони в діелектричних кластерах.....	23
2 Енергія зв'язку та час життя позитрону у вакансіях металу.....	27
2.1. Вплив вакансії на роботу виходу позитрону і позитронію з металом.....	27
2.2 Позитрон в моновакансії.....	31
2.3 Енергія утворення моновакансії.....	32
2.4 Розрахунок енергії зв'язку позитрону у вакансіях металу.....	37
2.5 Розрахунок часу життя позитрону в моновакансії.....	38
Висновки.....	41
Список посилань	42
Додаток А.....	44
Додаток Б.....	47

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ, ПРИЗНАЧЕНЬ, СИМВОЛОВ, ТЕРМІН

а. о. – атомні одиниці

ЕВ – електрон-вольт

ЕМІ – електромагнітний імпульс

ЕОМ – електронна обчислювальна машина

НДР – науково-дослідна робота

ОЦ – обчислювальний центр

ПЕОМ - персональна електронна обчислювальна машина

ВСТУП

У багатьох розділах фізики металів точкові дефекти відіграють важливу роль. Дифузія, дифузійні фазові перетворення, структурні зміни під опроміненням, низка механізмів внутрішнього тертя повністю визначаються властивостями точкових дефектів. Пластична деформація, особливо за підвищеної температури, значною мірою контролюється різними взаємодіями точкових дефектів з дислокаціями. Фононні спектри, пружні властивості, поведінка електронної підсистеми металу також чутливі до точкових дефектів. Вони зумовлюють залишковий електричний опір, впливають на гальваномагнітні ефекти, швидкість анігіляції позитронів.

Останні досягнення в матеріалознавстві та обробці напівпровідників були досягнуті в основному на основі глибокого розуміння, ефективного управління та розширеного застосування точкових дефектів у основних напівпровідниках, таким чином знайшовши відповідні методи, такі як легування та інженерія дефектів, як традиційне науково-технологічне рішення. Тим часом двовимірні (2D) шаруваті напівпровідники зараз привертають величезну увагу через промислові потреби та їх багату фізику на нанорозмірі; оскільки ми наближаємося до кінця критичних розмірів пристроїв у кремнієвій технології, ультратонкі напівпровідники мають

потенціал як каналові матеріали наступного покоління, і нова фізика також виникає в таких зменшених розмірах, де утримання електронів, фононів та інших квазічастинок є значним. Тому корисно та цікаво зрозуміти та переосмислити вплив дефектів решітки шляхом дослідження їх взаємодії з носіями енергії/заряду основної речовини. Потенційно встановлене розуміння надасть безпрецедентні можливості для реалізації нових функціональних можливостей і підвищення ефективності збору енергії та оптоелектронних пристроїв.

На додаток до фундаментальної наукової точки зору, вплив точкових дефектів на інтегрований термоелектричний транспорт, а також процес переносу ентропії в термоелектричних матеріалах ретельно досліджується. Точкові дефекти потенційно можуть подолати небажаний зв'язок між електропровідністю, теплопровідністю та термоЕРС, який часто називають «термоелектричним Бермудським трикутником». Максимальна термоелектрична продуктивність демонструється з проміжною щільністю дефектів, коли вони вигідно та багатофункціонально діють як донори електронів, а також як сильно залежні від енергії розсіювачі електронів і фононів. Таким чином, це хороший приклад того, як фізика фундаментальних дефектів може бути застосована для практичних пристроїв у відновлювальних джерелах енергії.

Одним із найчутливіших способів діагностики дефектів та стану поверхні є метод анігіляції позитронів. Головною рисою позитрона є енергія зв'язку та час життя у середовищі. В більшості випадків позитрони емітуються до металу радіоактивним ізотопом, що виділяє позитрони дуже високих енергій – близько 1 МеВ. На його шляху встановлюють атенюатор – зразок, у якому позитрон значно втрачає енергію в непружних зіштовхуваннях з атомами, та був з енергією близько 103 эВ надходить вже до досліджуваного металу. Далі, лише за кілька пікасекунд, позитрон термалізується, розсіюючись на фононах. Будучи античастинками, електрон

металу та позитрон можуть попарно анігілювати з випускненням γ -квантів. Швидкість анігіляції позитрону в середовищі залежить від концентрації електронів оточення. Аналіз анігіляційних спектрів показує, що навіть за $T = 10$ К позитрони в металах термалізовані. Взаємодія електрона та позитрону може призводити також до утворення пов'язаних станів – атомів позитронію (Ps) за аналогією з екситоном, утвореним електроном та діркою. Структура таких утворень аналогічна атомів водню. Однак наведена маса атома Ps дорівнює приблизно половині електронної маси, тому енергія зв'язку атома позитрону дорівнює 13,6 еВ. Позитрон, що зустрічався з вакансією, може бути енергетично вигідним локалізуватися в ній. Це було вперше експериментально показано у роботі співробітників Інституту металофізики НАНУ Дехтяра І.Я., Міхаленкова В.С. та Левіною Д.А. Процес резонансного розсіювання на моновакансіях дає найвищі швидкості захоплення, що зумовлює, до збільшення часу його життя у зразку, що спостерігається на практиці.

1. ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД. ОСНОВНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ВАКАНСІЇ

1.1 Основні відомості про точкові дефекти

Точковий дефект також називається нульмерним дефектом. Нульмерний дефект – це локальне порушення у кристалічній структурі. Розмір точкових дефектів приблизно дорівнює одному або декільком (небагатьом) міжатомних відстаней у всіх трьох вимірах.

Нульмерні дефекти можна умовно поділити на кілька основних типів:

1) вакансія - це вільне місце в кристалічній решітці;
2) міжвузельний атом – це атом, який був вибитий з початкового місця і знаходиться в міжвузлях кристалічних ґрат.

3) домішковий атом заміщення – це атом домішки, який заміщає місце атома основної речовини у кристалічній решітці. У позиціях заміщення можуть бути атоми, які за своїми розмірами та електронними властивостями відносно слабо відрізняються від основних атомів.

4) домішковий атом застосування – це домішковий атом, який розташовується між кристалічними осередками. Оскільки частки перебувають у постійному русі, дефект є неминучим. Поки температура

кристала вище абсолютного нуля, атоми в кристалі будуть у постійному русі, та їх взаємодія з навколишніми атомами досягає рівноваги. При підвищенні температури енергія руху атомів збільшується, тому атоми мають шанс вийти з положення рівноваги та створити дефекти. Ці точкові дефекти, отримані через тепловий рух, є тепловими дефектами. Тепловий дефект може бути представлений у двох основних формах: дефекти Френкеля та дефекти Шотткі. [1]

Найбільш простими за структурою і водночас найбільш важливими точковими дефектами є одиночні вакансії (моновакансії) та міжвузлові атоми. Домішні атоми також слід вважати точковими дефектами. На відміну від домішкових атомів вакансії (власні) міжвузлові атоми та його комплекси (кластери) називають власними точковими дефектами. Власні точкові дефекти є невід'ємним елементом дефектної структури реального кристала. Якщо можна (з дотриманням необхідних обережностей) виростити кристал, що не містить макроскопічного обсягу дислокації, то створити кристал без точкових дефектів неможливо в принципі. За будь-якої кінцевої температури T рівноважна відносна концентрація вакансій дорівнює

$$C_V = \exp(S_V^f/k)\exp(-E_V^f/kT) \quad (1.1)$$

де E_V^f -енергія утворення вакансії;

S_V^f -ентропія утворення вакансії;

k - стала Больцмана. Аналогічні вирази визначають концентрації інших точкових дефектів.

У багатьох розділах фізики металів точкові дефекти відіграють важливу роль. Дифузія, дифузійні фазові перетворення, структурні зміни під опроміненням, низка механізмів внутрішнього тертя повністю визначаються властивостями точкових дефектів. Пластична деформація, особливо за підвищеної температури, значною мірою контролюється різними

взаємодіями точкових дефектів з дислокаціями. Фононні спектри, пружні властивості, поведінка електронної підсистеми металу також чутливі до точкових дефектів. Вони зумовлюють залишковий електричний опір, впливають на гальваномагнітні ефекти, швидкість анігіляції позитронів.[2]

Найважливіша властивість точкових дефектів – їхня висока рухливість, тобто здатність мігрувати по ґратах кристала. Макроскопічними проявами рухливості є самодифузія та внутрішнє тертя та пов'язані з ними властивості електронної підсистеми, наприклад, дифузне звуження ліній ядерного магнітного резонансу.

Якщо рівноважна концентрація точкових дефектів визначається згідно з (1.1) енергією їх утворення, то ймовірність елементарного акту міграції точкового дефекту — переходу в найближче кристалографічне еквівалентне положення в результаті термічної флуктуації — виражається аналогічною формулою:

$$w = A \exp(S^m/k) \exp(-E^m/kT), \quad (1.2)$$

де S^m – ентропія міграції;

A - геометричний фактор, що враховує кількість рівномовних переходів в еквівалентні сусідні положення;

E^m - енергетичний бар'єр, що характеризує енергію міграції дефекту

Очевидно, ймовірність w і, отже, швидкість блукання дефекту по ґратах експоненційно зростають із підвищенням температури.

Мігруючи по ґратах, дефект може зустрітися з іншим собі подібним або дефектом іншого сорту. Якщо їхнє об'єднання у парний дефект, наприклад злиття двох вакансій у бівакансію, енергетично вигідне, тобто якщо енергія утворення E_{12}^f парного дефекту менше суми енергій вихідних дефектів E_1^f, E_2^f або, іншими словами, якщо енергія зв'язку

$$E_{12}^b = E_1^f + E_2^f - E_{12}^f \triangleright 0, \quad (1.3)$$

то парний дефект стійкий і в рівноважному кристалі присутні крім одиночних та парних, потрійних і т.д. дефекти в концентраціях, що виражаються формулами, аналогічними (1.1) та визначаються відповідними значеннями енергій зв'язку. [3]

При дослідженні радіаційних пошкоджень металів відіграє ще одна характерна енергія — гранична енергія зсуву атома з вузла решітки. За граничну енергію приймають таку кінетичну енергію, яку необхідно передати у зіткненні атома, що лежить у вузлі решітки, щоб він перемістився на відстань, на якій миттєва рекомбінація з вакансією, що утворилася, виключена. Оскільки при утворенні френклівської пари більшість енергії ed витрачається на зсуви (оборотні) навколишніх атомів решітки, ed , зазвичай у кілька разів перевищує суму $E_V^f + E_i^f$ де E_i^f -енергія утворення міжвузлового атома

Основними параметрами, що визначають поведінку вакансій, є енергія утворення, міграції, зв'язку та гранична енергія ed . Щоб зрозуміти та передбачити еволюцію точкових дефектів у металі у різних ситуаціях, що визначають значною мірою експлуатаційні властивості металевих матеріалів, необхідно знати ці значення енергії точкових дефектів. Вони входять як важливі характеристики у всі мікроскопічні теорії структурно-чутливих параметрів металів та сплавів.

На цей час перераховані енергії точкових дефектів виміряні різними методами більшість чистих металів. Розроблено також теоретичні прийоми оцінки енергій точкових дефектів. Однак точність цих прийомів значно нижча за точність експериментальних визначень. Однак вони корисні, тому що дозволяють зрозуміти фізичні причини, що визначають значення енергій, і передбачати в тих випадках, коли з тих чи інших причин виміру провести або неможливо або потрібні занадто великі витрати праці. Особливо це

стосується енергії комплексів, до складу яких входять домішкові атоми, оскільки кількість різних типів таких комплексів дуже велика. [4]

1.2 Енергія утворення вакансії

Енергія утворення вакансії (або коротко - енергія вакансії) E_V^f визначається як різниця енергії кристала, що містить одну вакансію U_{1V} , і бездефектного кристала з тієї ж кількості атомів. Для оцінки U_{1V} у всіх теоретичних підходах розглядають два етапи процесу утворення вакансії:

- перенесення атома (іона) з об'єму кристала на поверхню (щоб не вносити при цьому змін до структури поверхні, слід розглядати кристал, на поверхні якого є уступ одноатомної висоти зі зломом, як показано на малюнку 1.1, в який переноситься вийнятий атом; конфігурація уступу зі зломом не змінюється, а відбувається тільки переміщення зламу на одну міжатомну відстань);

- Зміщення навколишніх вакансію атомів (іонів) та перерозподіл електронів провідності, що призводить до зниження енергії кристала (релаксації). Ці зсуви особливо великі у безпосередній близькості від вакансії.

Слід зазначити різницю у теоретичних способах опису. У наближенні парних взаємодій електрони провідності окремо не розглядаються і вважається, що кристал складається з нейтральних атомів і на першому етапі утворення вакансії на поверхню кристала переноситься нейтральний атом, на другому етапі в процесі релаксації переміщуються також нейтральні атоми. У теоріях перерозподілу електронів провідності на поверхню видаляється іон із зарядом $+ze$ (z – валентність металу), а в процесі релаксації беруть участь

електрони провідності. Теоретично псевдопотенціала на поверхню видаляється псевдоіон. Вид потенціалу різний у різних варіантах теорії.[5]

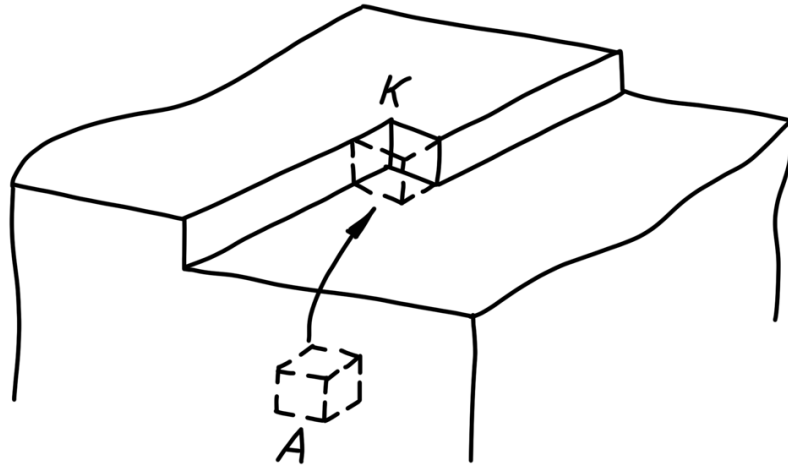


Рисунок 1.1 – Утворення вакансії в кристалі з простими кубічними ґратами, шляхом перенесення атома А на поверхню та приєднання до зламу К на поверхні

У наближенні парних взаємодій можна отримати найпростішу оцінку енергії вакансії, враховуючи взаємодію тільки найближчих сусідніх атомів, причому релаксацію нехтують, тому всі міжатомні відстані, а отже, і енергії- $U_{ij} = U_0$ вважають незмінними. Тоді енергія утворення вакансії E_V^f одно енергії "розірваних" q міжатомних зв'язків (q - координаційне число) за винятком енергії $q/2$ зв'язків, що відновилися, коли віддалений атом приєднався до зламу на уступі. Наприклад, у ГЦК-решітці $q = 12$, тож

$$E_V^f = 6 \cdot U_0 \quad (1.4)$$

Відповідне збільшення обсягу кристала, що припадає на одну вакансію, дорівнює одному атомному об'єму Ω_0 :

$$\Delta V = \Omega_0 \quad (1.5)$$

Оцінки (1.4) та (1.5) зазвичай виявляються завищеними, оскільки не враховують такі обставини:

- наближений характер виразу (1.1), який не враховує енергію електронів провідності та залежність енергії від обсягу кристала (ця обставина враховується у двох інших підходах);
- релаксації решітки навколо дефекту (в результаті найближчі до вакансії сусідні атоми зміщуються зі своїх вузлів до центру вакансії, щоб зменшити енергетично не вигідне порушення щільності кристала). [6]

Розрахунки енергії вакансій методом парних взаємодій виконують зазвичай з допомогою ЕОМ, дозволяють враховувати багато координаційних сфер і простежити за впливом постійних потенціалів міжатомного взаємодії енергію дефекту. У теоріях перерозподілу електронної густини розглядають не нейтральні атоми, а різні моделі решітки іонів та газу електронів провідності. Оцінюють зміну енергії кристала, пов'язане з порушенням рівномірного розподілу електронів провідності поблизу вакансії внаслідок відсутності цього вузла позитивного іона. Відсутність заряду $+ze$ рівносильно внесенню у вакантний вузол надлишкового заряду $-ze$, що викликає електростатичне відштовхування електронів провідності та зменшення їх щільності $n(r)$ поблизу вакансії. Оскільки електрони провідності є ферміївським газом, між ними діють крім електростатичних та кінетичні (відштовхування), обмінні та кореляційні сили.

Вплив надлишкового точкового заряду Δze на розподіл електронів провідності вперше розглянув Мотт, досліджуючи розподіл електронів провідності поблизу разновалентного домішкового атома, наприклад, Zn в Cu. Він показав, що електрони провідності екранують надлишковий заряд іона. Δze , так що їх щільність зменшується з відстанню r від іона за законом

$$n(r) \approx \exp(-\gamma \cdot r), \quad (1.6)$$

$$\gamma^2 = (4me^2/h^2)(3n_0/\pi)^{1/3}, \quad (1.7)$$

де m , e – маса та заряд електрона;

h – постійна Планка;

n_0 - щільність електронів провідності.

Щодо вакантного вузла подібну модель досліджував Фумі. У його моделі позитивний заряд іонів решітки металу валентності z вважається рівномірно розмазаним в обсязі кристала (модель "желе") та компенсованим зарядом електронів провідності ("електронного газу"). При освіті вакансії іон видаляється на поверхню, що, як уже говорилося, еквівалентно внесенню заряду - електрони, що відштовхує ze . Встановлюється їх новий нерівномірний розподіл. Його енергія E_1 визначається характером екранування надлишкового заряду електричним газом. Оцінка дає

$$E_1 \approx (2/3)zE_F, \quad (1.8)$$

де E_F - Енергія Фермі.

Збільшення обсягу кристала при переносі іона на поверхню знижує енергію електронного газу $E_1 \approx (2/5)zE_F$. Сумарна енергія кристала збільшується з появою вакансії на $E_1 - E_2 \approx (4/15)zE_F$. Враховуючи релаксації іонних кістяків за формулою Борна-Майєра дає для Cu , Ag і Au додаткове зниження енергії на $E_3 = 0,2 \div 0,3\text{eV}$. Для одновалентних металів виходить таким чином близьке до експериментальних даних значення E_V^f , Як показано в таблиці 1. Однак для $z = 2, 3, \dots$ модель желе дає сильно завищені значення E_V^f . [7]

Подальше уточнення моделі перерозподілу електронної щільності проводилося з метою шляхом вдалого вибору потенціалу вакантного вузла отримати правильні значення E_V^f для багатовалентних металів, врахувати обмінні та кореляційні поправки в енергії електронного газу, отримати у

розподілі щільності $n(r)$ фрідлівські осциляції, важливі при розрахунку взаємодії дефектів, отримати розподіл $n(r)$ всередині вакансії (що необхідно, наприклад, для розрахунку часу життя позитрона, захопленого у вакансію). Для вирішення цих завдань виявився корисним спосіб функціоналу щільності Кона-Хоенберга, який зарекомендував себе щодо неоднорідного розподілу щільності електронів на поверхні кристала.

З ідеї методу функціоналу густини розподіл $n(r)$ електронів у заданому зовнішньому полі $v(r)$ що доставляє мінімум функціоналу енергії

$$E(n) = T_s(n) + E_{xc}(n) + U_{es}(n), \quad (1.9)$$

де $T_s(n)$ - кінетична енергія;

$E_{xc}(n)$ - обмінна та кореляційна енергія електронного газу;

$U_{es}(n)$ - електростатична енергія електронів та іонів.

Щільність електронів

$$n = \sum_j |\psi_j(r)|^2, \quad (1.10)$$

де ψ_j - вирішення одноелектронного рівняння Шредінгера для електрона у полі з потенціалом $V_{e\phi}(n, r)$. Додавання ведеться за всіма станами j нижче рівня Фермі. Зручно уявити $V_{e\phi}$ у вигляді

$$V_{e\phi}(n, r) = \phi(r) + \delta V(r) + \mu_{xc}(n, r), \quad (1.11)$$

$$\phi(r) = \int dr' \frac{n(r') - n_+(r')}{|r - r'|}, \quad (1.12)$$

де $\phi(r)$ - електростатичний потенціал електронів та деякого фіктивного нейтралізуючого заряду $n_+(r')$;

$$\delta V(r) = \int dr' \frac{n_+(r')}{|r - r'|} + \sum W(|r - R_j|), \quad (1.13)$$

де $W(r) = -(z/r) + W_R(r)$ - потенціал іонів, що включає короткодійоче відштовхування $W_R(r)$. При відповідному виборі $n_+(r)$ величина $\delta V(r)$ є малим обуренням у виразі (1.11).

Сферична симетрія вакансії дозволяє в рівнянні Шредінгера для ψ_j відокремити кутові змінні та радіальної частини U_{kl} отримати рівняння

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + V_{\text{еф}} + \frac{l(l+1)}{2r^2} \right] U_{kl} = \left[\mu_0 + \frac{1}{2} (k^2 - k_F^2) \right] U_{kl}, \quad (1.14)$$

де хімічний потенціал μ_0 в обсязі кристала дорівнює

$$\mu_0 = \frac{1}{2} k_F^2 + \mu_{\text{хс}}(n_0), \quad (1.15)$$

де $\mu_{\text{хс}}(n_0)$ - обмінна та кореляційна енергія, що визначається виразом Вігнера-Зейца

$$-[0,458/r_s(n)] - [0,44/(r_s(n) + 7,8)], \quad (1.16)$$

де $r_s(n)$ - радіус сфери, обсяг якої посідає один електрон;

k_F - хвиль вектор на поверхні ферми. Щільність електронів дорівнює

$$n(r) = \frac{1}{\pi^2} \int_0^{K_F} dk k^2 \sum_l (2l+1) \left(\frac{U_{kl}}{r} \right)^2, \quad (1.17)$$

Рівняння (1.11), (1.13), (1.15), (1.17) утворюють замкнуту систему. Якщо залишок ефективного потенціалу $\phi(r) + \mu_{\text{хс}}$ досить симетричний, цю систему можна вирішити чисельно самоузгодженим методом послідовних

наближень, починаючи із затравного потенціалу V_{ef} взятого за Томасом-Фермі. Як потенціал іона береться

$$\delta V = C\theta(R - r), \quad (1.18)$$

Де θ – функція Хевісайду, а C є варіаційним параметром, значення якого перебуває з умови мінімуму E_V^f . [8]

Обчислені розподіли електронної густини у вакансіях представлені малюнку 1.2. Очевидно, навіть у центрі вакансії значення $n(r)$ становить 0,10 - 0,25 щільності обсягом кристала.

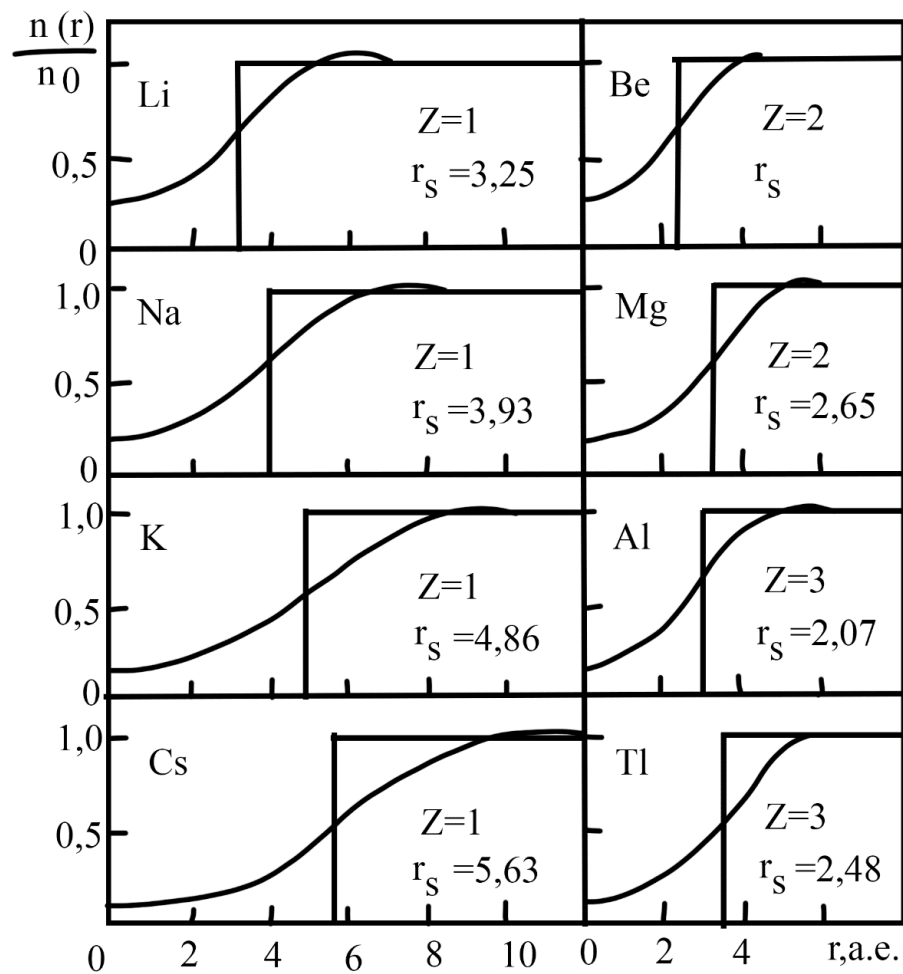


Рисунок 1.2 – Розподіл електронної густини $n(r)/n_0$ поблизу вакансії у моделі желе. Прямокутний ступінь - густина позитивного заряду ρ_0 . Відстань від центру вакансії – в атомних одиницях

У статистичній моделі щільність заряду у центрі вакансії у шляхетних металах виходить менше, ніж показано малюнку 1.2. У теорії псевдопотенціалу розглядається рух електронів провідності в полі іонних кістяків. Електростатичне і кінетичне відштовхування, які електрони провідності отримують з боку електронів кістяків, може бути описано деяким ефективним потенціалом V , який називається псевдопотенціалом і який залежить, загалом кажучи, від квазіімпульсу електрона p . Оскільки псевдопотенціал описує сумарний вплив на електрони провідності заряду ядра і його внутрішніх електронних оболонок кістяка, що екранують його, — величина $V(p, r)$ мала порівняно із середньою кінетичною енергією електронів провідності та може розглядатися як мале обурення. Це дозволяє визначати енергію електронів провідності за допомогою теорії збурення.

В одних варіантах теорії псевдопотенціал обчислюється за першими принципами, в інших описується належним чином підібраними параметрами (модельний псевдопотенціал). У найпростішому випадку локальний {тобто. незалежний від p) псевдопотенціал має вигляд

$$W(r) = C(r < r_c) \quad W(r) = -ze/r(r > r_c) \quad (1.19)$$

і визначається параметрами C і r_c . При заданому розташуванні псевдоіонів визначають енергію E_p електронів провідності. Якщо до неї додати енергію взаємодії іонів E_M , вийде повна енергія металу:

$$E = E_p + E_M = E_0 + E_1 + E_2 + E_M, \quad (1.20)$$

де E_0 - Енергія рівномірно розподіленого електронного газу в полі іонів (енергія желе);

E_1 та E_2 – поправки 1-го та 2-го порядку теорії збурень:

$$E_1 = \frac{zN^2}{V} \lim_{k \rightarrow 0} \left[W(k) + \frac{4\pi z}{k^2} \right], \quad (1.21)$$

де N – число іонів обсягом V ,

$W(k) = \int dr W(r) \exp(ikr)$ фур'є-трансформанта потенціалу (1.20);

$$E_2 = \frac{N}{2V} \sum_k \left[W^2(k) \left(\frac{1}{\epsilon(k)} - 1 \right) \frac{k^2}{4\pi} \right] A(k), \quad (1.22)$$

де $\epsilon(k)$ - Діелектрична функція.

$$A(k) = \frac{1}{N} |\sum_I \exp(ikR_I)|^2, \quad (1.23)$$

де $A(k)$ - Структурний фактор, R_I - положення іонів.

У цій моделі щільність електронів $n(r)$ є лінійна суперпозиція сферичних густин заряду:

$$n(r) = \int \frac{dk}{(2\pi)^3} W(k) \left(\frac{1}{\epsilon} - 1 \right) \frac{k^2}{4\pi} \exp(ikr) \quad (1.24)$$

центри яких збігаються із центрами іонів. Ці сферичні розподіли однакові на всіх іонах незалежно від їхнього взаємного розташування та наявності дефектів. Енергії E_0 та E_1 у співвідношенні (1.20) залежать тільки від обсягу кристала V і не залежать від розташування іонів; E_2 та E_M залежать через $A(k)$ також від розташування іонів і можуть бути представлені за допомогою суми енергій парних взаємодій іонів. Отже, вираз (1.20) можна подати у вигляді

$$E_p = E_v + \frac{1}{2} \sum_{I,m} \phi(R_I - R_m) \quad (1.25)$$

Якщо в решітці є дефект, в (1.23) змінюються обидва доданки. Енергія дефекту, наприклад вакансії, дорівнює

$$E_v^f = E_v^I + \Delta E_R - E_p, \quad (1.26)$$

де E_v^I -значення E_v для кристала із дефектом; ΔE_R - Енергія релаксації. Слід наголосити, що вираз (1.25) містить різниці великих величин, особливо у випадку багатовалентних металів.[9]

Результати розрахунків за цією схемою залежать від вибору параметрів C та r у співвідношенні (1.18).

На закінчення можна відзначити, що хоча за останні 25 років є суттєві успіхи в теоретичних дослідженнях електронної структури металу з дефектами та основними факторами, що визначають енергію точкових дефектів, які можна вважати з'ясованими, теорія ще не дозволяє обчислювати скільки-небудь надійно численні значення енергії. Тому їх визначення слід покладатися на експериментальні методи. Цей висновок стосується не тільки енергії утворення вакансій, але й інших енергетичних характеристик дефектів.

1.3 Електрони та позитрони в діелектричних кластерах

Одне із тестових завдань кластерної фізики – вивчення структури зарядженої крапельки атомів інертного газу та енергії зв'язку електрона в ній. Але для вирішення цього завдання потрібно попередньо дослідити спектр енергії електронів, інжектованих рідину.[10]

Дослідження стану легкої зарядженої частки (електрон, позитрон) у конденсованому середовищі є предметом багатьох теоретичних та експериментальних досліджень. У слабо поляризованих рідинах та густих газах спостерігається автолокалізація частинок. Локалізовані стани термодинамічно вигідні, якщо при локалізації вільна енергія системи зменшується, тобто якщо енергія зв'язку частки в полі флуктуацій атомів перевищує роботу зі створення цієї флуктуації. Цього можна досягти або при підвищенні густини середовища, або при зниженні її температури. Через розбіжності у характері взаємодії частинок з атомами середовища можуть локалізуватися або у бульбашках, або на кластерах речовини.

Позитрон - античастка електрона, що має однаковий, але протилежний за знаком заряд, інші характеристики такі ж, як і у електрона.

Історія розвитку методів позитронної анігіляції розпочалася 86 років тому і ділиться на кілька етапів.

У 1928 році Поль Адрієн Моріс Дірак вперше запропонував існування позитрона. У теорії Дірака показаний не тільки електрон, який має негативний електричний заряд, але й аналогічна частка, яка має позитивний заряд. Тоді існування позитрона ще не було підтверджено, тому такий висновок вважався як «зайве рішення» рівнянь Дірака. Проте позитроне відкриття стало першою перемогою цієї теорії.

У теорії Дірака показано, що існує зв'язок між електроном та позитроном (електрон-позитронна пара). Позитрон може анігілювати з електроном. У цьому процесі мають з'явитися два фотони, які мають суму енергії $2 \times 0,511 \text{ MeV}$. Оскільки були відомі природні радіоактивні речовини, що випускали γ -кванти з енергією більше 1 MeV, було можливим отримати позитрони в лабораторії, що було зроблено. Експериментальне порівняння властивостей позитронів і електронів показало, що це фізичні характеристики цих частинок, крім знака електричного заряду, збігаються .[11]

Позитрон був відкритий в 1932 американським фізиком Андерсоном при спостереженні космічного випромінювання за допомогою камери Вільсона, поміщеної в магнітне поле. Він сфотографував сліди частинок, які дуже нагадували сліди електронів, але мали вигин під дією магнітного поля, протилежний слідам електронів, що свідчило про позитивний електричний заряд виявлених частинок. Незабаром після цього відкриття, також за допомогою камери Вільсона, були отримані фотографії, що проливали світло на походження позитронів: під дією γ -квантів вторинного космічного випромінювання позитрони народжувалися в парах із звичайними електронами. Такі властивості знову відкритої частинки опинилися в разючій згоді з релятивістською теорією електрона Дірака. У 1934 році Ірен і Фредерік Жоліо-Кюрі у Франції відкрили ще одне джерело позитронів - β^+ радіоактивність. Назву «позитрон» вигадав сам Андерсон. Андерсон також пропонував перейменувати електрони на «негатрони»; цей термін щодо електронів, як і раніше, використовують у випадках, коли електрони і позитрони розглядаються спільно; у цих випадках термін «електрон» часто відносять до обох частинок – електрону (негатрону) та позитрону. Позитрон виявився першою відкритою античасткою. Існування античастинки електрона та відповідність сумарних властивостей двох античастинок висновкам теорії Дірака, яка могла бути узагальнена на інші частки, вказували на можливість парної природи всіх елементарних частинок та орієнтувало наступні фізичні дослідження.

Така орієнтація виявилася надзвичайно плідною, і в даний час парна природа елементарних частинок є точно встановленим законом природи, обґрунтованим великою кількістю експериментальних фактів

Взаємодія електронів з атомами, що мають велику поляризованість, носить характер тяжіння, тому їх локалізація в густих газах можлива на флуктуаціях згущення - кластерах. Електронні кластери експериментально виявлені у густому газоподібному ксеноні. Взаємодія позитрона з атомом

внаслідок відсутності обміну завжди має характер тяжіння. Позитронні кластери експериментально виявлені у густих газоподібних геліях та аргонах на лінії насичення.

У кластерах, що містять велику кількість атомів, "інжектвані" частинки майже вільні. Енергетичний спектр частинок визначається характером розсіювання на атомах та залежить від ступеня розподілу середовища. Тому першочерговим завданням є дослідження стану майже вільних електронів та позитронів у необмежених рідинах.[12]

Добре відомо, що теплові електрони або позитрони, інжектвані сильно поляризовані неполярні рідини, мають високу рухливість, тобто. "майже вільні". Зазвичай це рідини, атоми чи молекули яких мають поляризованість $\alpha > 10 \text{ аЗ0}$. При цьому внаслідок поляризації основний рівень енергії у такій системі знижується. Вводиться поняття про "дно зони провідності" $V_0 < 0$. Положення дна зони провідності та рухливості електронів визначено у багатьох речовинах залежно від густини ρ . При переході з газу рідина, тобто в ході стиснення, дно електронної зони $V_0(\rho)$ проходить через мінімум. Положення цього мінімуму практично збігається зі становищем максимуму рухливості електрона $\mu(\rho)$. Для зріджених аргону, криптону та ксенону ця особливість відповідає концентрації атомів $\rho \ll 1, 2 \times 10^{22} \text{ см}^{-3}$. Опис обох явищ пов'язують із проходженням через нуль довжини розсіювання електрона на атомі (молекулі) рідини. Величина L (довжина розсіювання) є мірою взаємодії із середовищем повільної квантової частки, енергія якої дуже близька до дна зони провідності.

Експериментальна інформація про m_{eff} має непрямий характер. Сильно збуджений електрон атома рідини багато в чому подібний до майже вільного електрона. Їхні ефективні маси дуже близькі. І оскільки енергії зв'язку сильно збуджених станів пропорційні m_{eff} , то спектри є потрібна інформація. Вона отримана для електронів у твердих інертних газах та частково для рідин у

потрійних точках. Величини вони $m_{\text{eff}}/m \ll 0,3 - 0,6$. Ефективна маса вказує кількісно, наскільки насправді вільна "майже вільна" частка.[13]

Розв'язання задачі про ефективну масу пов'язане з з'ясуванням величини першої фази розсіювання частки на атомі рідини. Перша фаза необхідна розрахунку перетину розсіювання частки, і навіть її рухливості. Особливо це необхідно вивчення режиму при нульовій довжині розсіювання теплового електрона.

2 ЕНЕРГІЯ ЗВ'ЯЗКУ І ЧАС ЖИТТЯ ПОЗИТРОНА У ВАКАНСІЇ МЕТАЛУ

2.1 Вплив вакансій на роботу виходу позитрону та позитрону з металу

Одним із дуже чутливих методів діагностики об'ємних дефектів та стану поверхні є метод анігіляції позитронів. Основною характеристикою позитрона є енергія зв'язку та час життя у середовищі. Зазвичай позитрони емітуються до металу радіоактивним ізотопом, що випускає позитрони дуже високих енергій – близько 1 МеВ. На його шляху встановлюють атенюатор – зразок, у якому позитрон значно втрачає енергію в непружних зіткненнях з атомами, та був з енергією близько 103 эВ надходить вже до досліджуваній метал. Далі, лише за кілька пікасекунд, позитрон термалізується,

розсіюючись на фононах. Будучи античастинками, електрон металу та позитрон можуть попарно анігілювати з випускненням γ -квантів. Швидкість анігіляції позитрону в середовищі залежить від концентрації електронів оточення. Аналіз анігіляційних спектрів показує, що навіть за $T = 10$ К позитрони в металах термалізовані. Взаємодія електрона та позитрону може призводити також до утворення пов'язаних станів – атомів позитронію (Ps) за аналогією з екситоном, утвореним електроном та діркою. Структура таких утворень аналогічна атомів водню. Однак наведена маса атома Ps дорівнює приблизно половині електронної маси, тому енергія зв'язку атома позитрону дорівнює $Ry/2$, $Ry = 13,6$ еВ. Позитрон, що зустрічався з вакансією, може бути енергетично вигідним локалізуватися в ній. Це було вперше експериментально показано у роботі співробітників Інституту металофізики НАНУ Дехтяра І.Я., Міхаленкова В.С. та Левіною Д.А. Механізм резонансного розсіювання на моновакансіях забезпечує дуже високі швидкості захоплення, що призводить, природно, до збільшення часу його життя у зразку, що спостерігається на практиці.[14]

Позитрон, який зустрівся з вакансією, може бути енергетичновигідним локалізуватися у ній. Механізм резонансного розсіювання на моновакансіях забезпечує дуже високі швидкості захоплення, що наводить, природно, до збільшення часу його життя у зразку.

При виробництві з алюмінієвим зразком спостерігається ослаблення інтенсивності позитронів, емітуючих в результаті дифузії з алюмінієвого зразка, що містить дефекти. Поясненням цього ефекту може бути зміна знака роботи виходу позитрону внаслідок його локалізації в приповерхній вакансії, звідки він може тунельним переходом перейти вже в поверхневому стані і там анігілювати.

Важливою характеристикою стану позитрона у металі є його вихідна робота.

Робота виходу локалізованого у вакансії позитрону W_{pvac} відрізняється від W_p на величину енергії зв'язку позитрону у вакансії E_b

$$W_p^{vac} = W_p + E_b, \quad (2.1)$$

Якщо $W_p < 0$, можлива зміна знака роботи виходу, $W_{pvac} > 0$, як показано малюнку 2.1. До металів з негативними значеннями W_p відносяться, наприклад, мідь, алюміній, залізо, молібден, нікель, хром, титан. Для них щодо аналізу енергетичного спектра зворотної емісії були отримані значення $W_p < 0$.

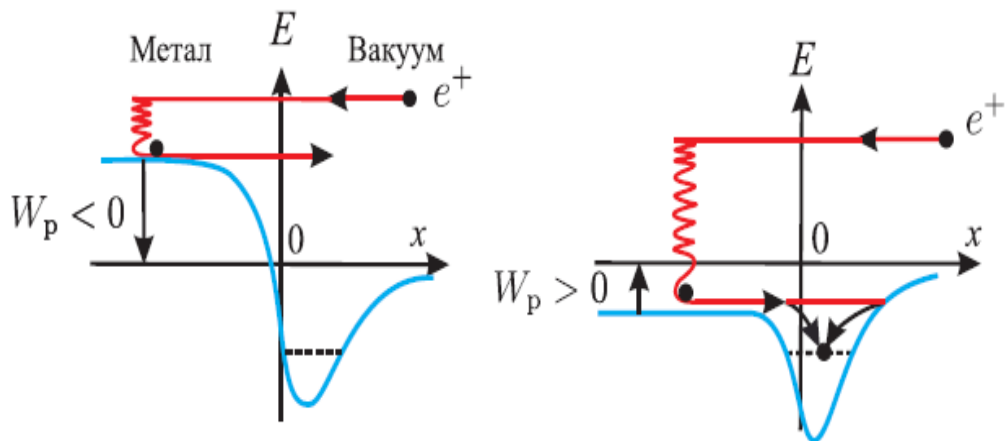


Рисунок 2.1 - Енергетичні схеми потенціалів взаємодії позитрону з металами, для яких $W_p < 0$ або $W_p > 0$

Одним із каналів фіксації зворотної емісії позитронів служить реєстрація "емісії" атомів позитрону. Утворення атомів позитрону Ps неможливо обсягом металу. Атоми Ps утворюються на хвості електронного розподілу поверхнею. Робота виходу атома позитрона залежить від того, вільний позитрон у металі W_{ps} або він локалізований W_{ps}^{vac} тому

$$W_{ps} = W_e + W_p - \frac{Ry}{2}, \quad (2.2)$$

$$W_{ps}^{vac} = W_{ps} + E_b, \quad (2.3)$$

де w_e - робота виходу електрона;

R_y - $13,6 \text{ eV}$.

Роботу виходу позитрона можна обчислити, використовуючи спосіб функціоналу щільності.

З зростанням температури спостерігається зменшення w_{ps} за абсолютною величиною.

Як w_e , та й W_p є тензорний величиною оскільки залежить від кристалографічного напрямку грані.

Робота виходу позитрона може бути обчислена, якщо використовувати спосіб функціоналу густини.

2.2 Позитрон у моновакансії

Для розрахунку роботи виходу слід відняти енергію метала з позитроном у вакансії $E_{tot}^{(1)}$ енергію металу з „пустою” вакансією та „вільним” позитроном $E_{tot}^{(2)}$ та енергію металевого зразка та позитрону, який знаходиться далеко від нього $E_{tot}^{(3)}$. [15]

Тоді

$$W_p = E_{tot}^{(3)} - E_{tot}^{(2)}, \quad (2.4)$$

$$W_p^{vac} = E_{tot}^{(3)} - E_{tot}^{(1)}, \quad (2.5)$$

$$E_b = E_{tot}^{(2)} - E_{tot}^{(1)} \quad (2.6)$$

Величина E_{tot} визначається як

$$E_{tot} = E_{sj} + E_p, \quad (2.7)$$

де E_{sj} - Енергія металу в моделі стабільного желе;

E_p - Енергія позитрона.

Зручно прийняти $E_p^{(3)} = 0$, якщо позитрон знаходиться далеко поза металом. Тим самим вибирається рівень відліку енергії.

Величину E_{sj} зручно уявити як

$$E_{sj} = E_{sj}^{bulk} + E_v, \quad (2.8)$$

де E_{sj}^{bulk} - відповідає енергії „незбудженого” металу;

E_v - Енергія вакансії;

Таким чином E_{sj}^{bulk} скорочуватиметься у всіх визначеннях E_{tot} .

Основному стану позитрона відповідає хвильова функція, яку позначим $\psi(r)$. Позначаючи позитронний поділ як

$$n_p(r) = |\psi(r)|^2, \quad (2.9)$$

$$\int d^3r n_p(r) = 1 \quad (2.10)$$

Величину E_p можна висловити такий спосіб:

$$E_p = \int d^3r [-\psi(r)n_p(r) + E_{corr}^{p-e}[n_p(r), n_e(r)] + E_0\theta(r - R_v)\theta(R - r)n_p(r) + t_p] \quad (2.11)$$

Перший доданок відповідає електростатичної взаємодії позитрону з металом E_q , другий доданок описує внесок позитрон-електронних кореляцій E_{corr}^{p-e} , а третій доданок описує некулонівську позитрон-іонну взаємодію у кожній із осередків Вігнера-Зейтца, величина E_0 розрахована в -

псевдопотенційному наближенні, четвертий доданок - кінетична енергія позитрону,

$$T_p = \int d^3r t_p, \quad (2.12)$$

$$t_p = (2m_p)^{-1} |\nabla \psi(r)|^2 \quad (2.13)$$

Коли позитрон вільний, тобто знаходиться в межах металевого зразка, але далеко від вакансії, його хвильова функція (у межі $R \rightarrow \infty$) являє собою плоску хвилю. Тому що Об'єм вакансії не суттєвий у порівнянні з обсягом зразка, перший інтеграл (7) дорівнює величині електричного бар'єру на межі макроскопічного зразка D . [16] В цьому випадку

$$E_p^{(2)} = D + E_{corr}^{p-e} [n_p^+, n_e^+] + E_0, \quad (2.14)$$

де n_e^+ концентрація електрона у однорідній електронній рідині.

$$n_e^+ = \frac{3}{4} \pi r_s^2 = \frac{k_F^3}{3\pi^2} \quad (2.15)$$

де n_p^+ -концентрація позитрону в однорідній електронній рідині;

$$n_p^+ = \frac{3}{4} \pi R^3 \quad (2.16)$$

Таким чином, визначення роботи виходу w_p спрощується до

$$W_p = E_v^{(3)} - (E_v^{(2)} + E_p^{(2)}), \quad (2.17)$$

де енергія $E_v^{(2)} = E_v^{(3)}$ відповідає "порожній" вакансії.

Так як вакансія представляє собою порожнину, член E_0 як складова власної енергії позитрону $E_p^{(1)}$ Відсутнє. Кореляційний внесок у енергію $E_p^{(1)}$ має враховуватися просторовий розподіл позитрону та електронів у вакансіях.[17]

$$E_{corr}^{e-p}[n_e(r), n_p(r)] \equiv E_{corr}^{(1)} \quad (2.18)$$

2.3 Енергія утворення моновакансії

Енергія утворення порожньої вакансії. З міркувань математичної зручності припустимо, що металевий зразок має форму сфери радіусу R , у центрі якої знаходиться вакансія радіусом осередку Вігнер-Зейтца r_0 .

$$R_v = Z^{\frac{1}{3}} \cdot r_s, \quad (2.19)$$

де Z - Валентність металу.

Електронна рідина знаходиться в полі іонів, розподіл яких жорстко задано у вигляді щаблів:

$$n_i(r) = \begin{cases} 0, & r < r_0 \\ \frac{\vec{n}_e}{z}, & r_0 < r < R \\ 0, & r > R \end{cases} \quad (2.20)$$

Скористаємося градієнтною версією моделі стабільного желе. Для обліку електронних кореляцій використовувалася апроксимація Пайнса-Ноз'єра. Визначимо енергію, необхідну на освіту вакансії, як різницю енергій неоднорідного та однорідного металів:

$$e_{vac} = E[n_e(r)] - E[\vec{n}_e \theta(r - r_0)] \quad (2.21)$$

Вигляд $n_e(r)$ та величина ϵ_{vac} залежать від того, чи є вакансія "порожньою" або "обуреною" локалізованим у ній позитроном.

Не вирішуючи відповідне рівняння Ейлера для електронного розподілу $n_e(r)$, поставимо його у вигляді, як показано на малюнку 2.2.

$$n_e(r) = \bar{n}_e \begin{cases} B_1 \exp[b(r - r_0)], & r < r_0, \\ 1 - B_2 \exp[b(r_0 - r)], & r > r_0, \end{cases} \quad (2.22)$$

де b - Варіаційний параметр, величина якого буде знайдена в результаті мінімізації (1.21). З умови збереження повного числа електронів і умови зшивання $r = r_0$ випливає співвідношення між B_1 і B_2 . Визначивши $\epsilon_{vac} = 4\pi r_0^2 \sigma$, умову мінімуму енергії можна записати у вигляді

$$\left. \frac{d\sigma[\bar{n}_e, b, r_0]}{db} \right|_{\bar{n}_e, r_0} = 0, \quad (2.23)$$

де σ - Питома поверхнева енергія поверхні негативної кривизни. Величина параметра $b(r_0)$ для вакансії менша, ніж у плоскому випадку.[18]

Протилежна розмірна залежність $b(R)$ має місце на поверхні позитивної кривизни - сферичного кластера радіуса R . У цілому нині для простих металів ϵ_{vac} є монотонної функцією rs , й у лужних металів спостерігається непогане узгодження з експериментальними даними. Причиною інших розбіжностей є експоненційний (надто різкий) характер зменшення електронного профілю (1.22) у глибину вакансії. Це підтверджує порівняння значень електронної щільності (1.30) та коншемівського профілю у моделі нестабільного желе у центрі вакансії алюмінію: $n_e(0)/n_{eKS}(0) \approx 1/6$.

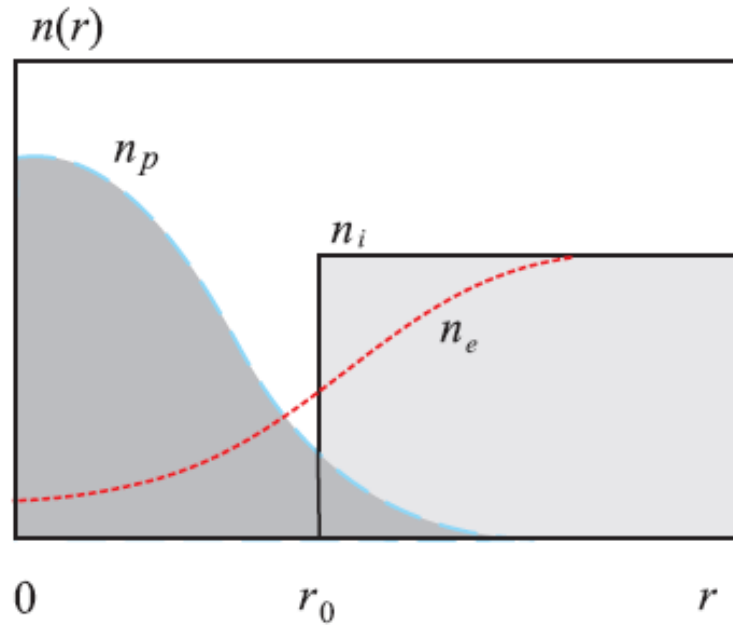


Рисунок 2.2 – Просторові профілі електронів, іонів та позитронів у вакансії.

Енергія металу є функціоналом неоднорідної електронної густини $n_e(r)$

$$E_{sj}[n_e(r)] = E_j[n_e(r)] + \Delta E[n_e(r)] \quad (2.24)$$

Енергія E_j записана в моделі звичайного (нестабільного) іонного желе. Відомо, що у цієї моделі поверхня нестабільна при $r_s \leq 2a_0$. У моделі стабільного желе член ΔE приблизно враховує енергію Маделунга іон-іонної взаємодії (точковість іонів), виправляє взаємодію електронів та іонів на малих відстанях у наближенні в псевдопотенціалі і усуває самодія позитивного фону в осередку Вігнера-Зейтца. Модель не враховує зонних ефектів та релаксації неоднорідного розподілу $n_i(r)$. Енергія в наближенні желе записується у звичайному вигляді

$$E_j = E_{xc} + T_e + E_q \quad (2.25)$$

Обмінно-кореляційна енергія електронної рідини представлена у наближенні локальної щільності

$$E_{xc} = \int d^3r \varepsilon_{xc}(n_e(r)) n_e(r), \quad (2.26)$$

$$\varepsilon_{xc} = -\left(-\frac{3}{4}\pi\right)(3\pi^2 n_e)^{\frac{1}{3}} - 0.0474 - 0.0155 \ln(3\pi^2 n_e)^{\frac{1}{3}} \quad (2.27)$$

Вважаючи, що зміни електронної густини поблизу кордону є плавними, функціонал кінетичної енергії можна уявити в градієнтному наближенні

$$T_e[n_e(r)] = \int d^3r \left\{ \frac{3}{10} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} n_e^{\frac{5}{3}} + \frac{1}{72} \frac{|\nabla n_e|^2}{n_e} + \frac{(3\pi^2)^{-\frac{2}{3}}}{540} \times \right. \\ \left. \times n_e^{\frac{1}{3}} \left[\left(\frac{\nabla n_e}{n} \right)^2 - \frac{9}{8} \left(\frac{\nabla n_e}{n} \right) \left| \frac{\nabla n_e}{n} \right|^2 + \frac{1}{3} \left| \frac{\nabla n_e}{n} \right|^4 \right] \right\} \quad (2.28)$$

Кулонівська компонента повної енергії має вигляд

$$E_q^{e-i-e} = \left(\frac{1}{2}\right) \int d^3r \psi(r) [n_e(r) - n_i(r)], \quad (2.29)$$

$$\psi(r) = \int d^3r' [n_e(r') - n_i(r')] |r - r'|^{-1} \quad (2.30)$$

Енергія, необхідна на утворення вакансії, що дорівнює різниці енергій неоднорідного та однорідного металу

$$E_v = E_{sj}[n_e(r)] - E_{sj}[n_e^+ \theta(r - R_v)], \quad (2.31)$$

де $\theta(r)$ - Поодинокі сходинка Хевісайда.

Вид $n_e(r)$ і величина E_v залежать від того, чи є вакансія „порожньою” або „обуреною” локалізованим ній позитроном.

Робота виходу електронів може бути виражена сумою об'ємної та поверхневий компонент моделі звичайного желе та поправки на стабілізацію- ΔW ,

$$W_e = W_j + \Delta W, \quad (2.32)$$

$$W_j = -\varepsilon_e - \phi(0), \quad (2.33)$$

де ε_e - Енергія на один електрон в однорідному желе

$$\varepsilon_e = -\left(\frac{3}{10}\right) k_F^2 + \left(\frac{3}{10}\pi\right) k_F + 0.0474 + 0.0155 \ln k_F, \quad (2.34)$$

де $\phi(0)$ - Значення електричного потенціалу на плоскій поверхні, тобто $\psi(r)|_{r=R_p \rightarrow \infty}$, або $\psi(r)|_{r=R \rightarrow \infty}$. Виправлення ΔW має вигляд

$$\Delta W = (C/n_e^+) \int_{-\infty}^0 dx [dn_e(x)/dx]. \quad (2.35)$$

2.4 Розрахунок енергії зв'язку позитрону у вакансіях металу

Припустимо, що основний стан локалізованого у вакансії позитрона описується параметризованою хвильовою функцією

$$\psi(r) = \left(\frac{a^3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \exp(-ar/2) \quad (2.36)$$

Тоді енергія нульових коливань позитрону

$$T_p^{(1)} = \frac{a^2}{8m_p} \quad (2.37)$$

Розподіл електронів усередині та навколо вакансії задається в такому вигляді

$$n_e(r) = n_e^+ \begin{cases} Ae^{b(r-R_v)}, & r < R_v \\ 1 - Be^{b(R_v-r)}, & r > R_v, \end{cases} \quad (2.38)$$

де b – параметр, величина якого буде знайдена в результаті мінімізації E_{sj} .

З умови збереження повного числа електронів та умови зшивки в $r = R_v$ виходить співвідношення між A та B . У межі $R_v \rightarrow \infty$ крива поверхня переходить у плоску, тоді $A = B = 1/2$. Аналогічно описується зовнішня поверхня металевго зразка.

У присутності позитрона в вакансії оптимальні профілі $n_e(r)$ і $n_p(r)$ визначаються з умов

$$\frac{dE_{tot}^{(1)}}{db} = 0, \quad \frac{dE_{tot}^{(1)}}{da} = 0, \quad (2.39)$$

Де $E_{tot}^{(1)} \equiv E_{tot}^{(1)}(n_e^+, a, b)$, причому «нові» значення b будуть відрізнятися від тих, які знайдені для порожньої вакансії, коли позитрон делокалізовано, тобто перебуває вдалині від ями. У виразі для повної енергії $E_{tot}^{(1)}$ від параметрів a і b залежить тільки її частина, відповідна області неоднорідності металу (вакансії) та енергії позитрону. Ця ж частина буде присутня при знаходженні енергії зв'язку позитрону у вакансії

$$E_b = (E_v^{(2)} + E_p^{(2)}) - (E_v^{(1)} - E_p^{(1)}) \quad (2.40)$$

У таблиці 2.1 наведено результати обчислень робіт виходу вільного - позитрону w_p і w_{ps} . Робота виходу w_p , складається з кількох членів, різних за знаком та для деяких металів, близьких по величині, і тому достатньо чутлива

до обчислення кожної з них. Це добре видно на прикладах Au і Cu при використанні різних оцінок E_0 - спрощений опис електронного профілю поблизу кордонів металу також призводить до похибок у обчисленні D. В цілому, однак, досягнуто згоду за знаком теоретичних значень w_p з наявними для деяких металів експериментальними даними.[20]

Робота виходу позитрон w_{ps} не залежить від величини поверхневого бар'єру та повністю визначається об'ємними властивостями металу Тому спостерігається згода з експериментальними даними не тільки за знаком, а й за величиною.

Таблиця 2.1 - Роботи виходу позитрону w_p , атома позитронію w_{ps} та їх компонент для деяких бездефектних металів.

Метал	w_p , eV		w_{ps} , eV	
	т	е	т	е
Na	3,66	-----	-0,18	-----
Au	0,50	-----	-3,57/-2,89	-2,24

Продовження таблиці 2.1

Ag	0,64/0,92	-----	-2,77/-2,49	-----
Cu	0,03/0,17	-0,6	-3,22/-2,54	-2,50
Mg	1,76	-----	-1,46	-----
Al	- 0,60	-0,19	-3,65	-2,78
Pb	0,18	-----	-2,91	-0,73
Mo	-0,78	-2,4	-4,28	-----
Fe	-1,44	-1,3	-4,49	-----
Ni	-0,36	-0,9	-3,61	-2,63
Cr	-1,45	-1,76	-4,65	-----

У таблиці 2.2 подано результати розрахунків енергії зв'язку позитроне E_b моновакансії та відповідних робіт з виходу W_p^{vac} і W_{ps}^{vac} , для повноти аналізу наведено також величини деяких їх компонент. Як очевидно з таблиці 2.2, локалізований позитрон стимулює додаткові "затікання" електронної рідини всередину вакансії, тим самим якби збільшуючи енергію утворення вакансії. Порівнюючи значення W_p таблиці 1 та значення W_p^{vac} таблиці 2.2, спостерігаємо зміну знаку роботи виходу позитрону під час його емісії з вакансії для металів, що мають $W_0 < 0$. Для цих металів отримали $E_b > |W_p|$. Для атомів позитрону спостерігається $W_{ps} < 0$, $W_{ps}^{\text{vac}} > 0$ для всіх досліджених металів.

Таблиця 2.2 - Оптимальні величини параметрів a і b , енергія зв'язку позитрону в моновакансії E_b , а також величини W_p^{vac} і W_{ps}^{vac} .

Метал	a, a_0^{-1}	b, a_0^{-1}	E_b	W_p^{vac}	W_{ps}^{vac}
			eV		
Na	0,30	0,53	1,11	4,77	0,93
Au	0,38	0,71	4,45/3,78	4,28	0,88

є

Продовження таблиці 2.2

Ag	0,38	0,67	3,65/3,37	4,29	0,88
Cu	0,42	0,80	3,95/3,27	3,88	0,73
Mg	0,36	0,91	2,50	4,26	1,04
Al	0,41	1,14	4,15	3,55	0,50
Pb	0,35	1,12	3,89	4,07	0,98
Mo	0,34	0,89	5,12	4,34	0,84
Fe	0,42	1,14	4,91	3,47	0,41
Ni	0,35	0,90	4,68	4,32	1,07
Cr	0,42	0,81	5,33	3,88	0,65

ВИСНОВКИ

У цій роботі розроблено методику розрахунку енергії зв'язку позитрону у вакансії металу та час життя позитрону у вакансії металу. Отримані результати якісно погоджуються з експериментально отриманими даними. Важливою характеристикою стану позитрона у металі є його вихідна робота. Для низки металів робота виходу вільних позитронів W_p є негативною. Цьому відповідає інтенсивна зворотна емісія інжекттованих позитронів, що спостерігається практично. По поверхні взаємодія позитрона та металу визначається силами зображення. Вдалині поверхнею одночастковий потенціал має асимптотику $(-e^2/4x)$, а поблизу поверхні реалізує потенційну яму i , відповідно, поверхневі стани для позитрона.

Наведено результати обчислень робіт виходу вільного позитрону w_p і позитронія w_{ps} . Робота виходу w_p , складається з кількох членів, різних за знаком та для деяких металів, близьких по величині, і тому достатньо чутлива до обчислення кожної з них. Це добре видно на прикладах Au і Cu при використанні різних оцінок E_0 . Спрощений опис електронного профілю поблизу кордонів металу також призводить до похибок у обчисленні D. В цілому, однак, досягнуто згоду за знаком теоретичних значень w_p з наявними для деяких металів експериментальними даними.

Робота виходу позитрон w_{ps} не залежить від величини поверхневого бар'єру та повністю визначається об'ємними властивостями металу. Тому спостерігається згода з експериментальними даними не тільки за знаком, а й за величиною.

Час життя позитрона у вакансії назад пропорційно швидкості анігіляції λ . Для перехідних металів розрахунок має бути змінено відповідно до можливості позитрона анігілювати з електронами внутрішніх оболонок іонів.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. Balerna, A. Dynamic properties and debye temperatures of bulk au and au clusters studied using extended x-ray absorption fine-structure spectroscopy [Text] / A. Balerna, S. Mobilio // Phys. Rev. B. — 1986. — Vol. 34. — Pp. 2293–2298.
2. J. G. Hou, B. Wang, J. Yang, X. R. Wang, H. Q. Wang, Q. Zhu, X. Xiao Phys.//Rev. Lett.-2001-№ 86(25)-pp 5321-5324.
3. de Heer, W. The physics of simple metal clusters: experimental aspects and simple models [Text] / W. de Heer // Rev. Mod. Phys. — 1993. — Vol. 65. — Pp. 611 – 676.
4. Babich, A. Effect of dielectric coating on the electron work function and surface stress of a metal [Text] / A. Babich, V. Pogosov // Surface Science. — 2009. — Vol. 603. — Pp. 2393– 2397
5. Korotkov A.N., Nazarov Yu.V. "Single-electron tunneling coexisting with the barrier suppression", Physica B, 1991, v. 173, p.217-222..
6. В. П. Курбацкий, В.В. Погосов. //Письма в ЖЭТФ-2004-№ 46(3)-с 526-533.
7. Д.В. Аверін, А.Н. Коротков, К. К. Likharev. //Phys. Rev. B-1991- № 44(12)-pp 6199-6211.
8. Kroto, H. Smalley, c60: Buckminsterfullerene [Text] / H. Kroto, J. Heath, S. O'Brien, R. Curl // Nature. — 1985. — Vol. 318. — Pp. 162 – 163
9. Pogosov, V. Energetics of metal slabs and clusters: the rectangle-box model [Text] / V. Pogosov, V. Kurbatsky, E. Vasyutin // Phys. Rev. B. — 2005. — Vol. 71. — P. 195410.
10. С. Фудзита. Введение в неравновесную квантовую статистическую механику- М.: Мир, 1969-207 с.
11. Погосов В.В., Васютин Е.В. // Фізика і хімія твердого тіла-2005-№2(6)- с 299.

12. Шпак, А. Введение в физику ультрадисперсных сред [Текст] / А. Шпак, В. Погосов, Ю. Куницкий. — К.: Академперіодика, 2006. — 424 с.
13. Погосов, В. Основы нанофізики і нанотехнологій [Текст] / В. Погосов, Г. Корніч, В. Васютін [та ін.]. — Запоріжжя: ЗНТУ, 2008. — 630 с.
14. Gloskovskii, A. Electron emission from films of ag and au nanoparticles excited by a femtosecond pump-probe laser [Text] / A. Gloskovskii, D. Valdaitsev, M. Cinchetti [et al.] // Phys. Rev. B. — 2008. — Vol. 77. — P.195427.
15. . J. Theory of positrons in solids and on solid surfaces [Text] / M. J. Puska, R. M. Nieminen // Rev. Mod. Phys. — 1994. — Vol. 66. — Pp. 841–897.
16. Маслов К.В., Шкловский В.А. // ЖЭТФ-1976- № 4(71)- с 1514-1519.
17. Томчук П.М., Федорович Р.Д.// ФТТ-1966-№ 8(7)-с 276-278.
18. Квантовый эффект Холла [Текст] / Под ред. Р. Пренджа, С. Гирвина. — М.: Мир, 1989. — 408 с.
19. Gorelik, L. Shuttle mechanism for charge transfer in coulomb blockade nanostructures [Text] / L. Gorelik, A. Isacson, M. Voinova [et al.] // Phys. Rev. Lett. — 1998. — Vol. 80. — Pp. 4526–4529.
20. Scheible, D. Effects of low attenuation in a nanomechanical electron shuttle [Text] / D. Scheible, C. Weiss, R. Blick // J. Appl. Phys. — 2004. — Vol. 96. — Pp. 1757–1759.

Додаток А

Лістинг програми "Енергія зв'язку позитрону до вакансії металу"

REM binding positron energy

P1 = 3.141593;

INPUT R0, N, A0, B0, D1;

REM r – vacancy radia, r0 – rs.

NO=1.0/(4.0/3.0*P1*(R*R*R));

REM N – abs. atoms, Z – valenty, N*Z – number of absent elecrons.

Z=1;

R=R0*pow((N*Z),(1.0/3.0);

LPRINT R0, N, R, A0, B0, D1

X = R * B0;

X0 = EXP (-X);

B3=(0.5-1.0/X+1/(X*X)*(1.0-X0))/(1.0+2.0/(X*X)*(1.0-0.5*X0);

A3 = 1-B3;

A9=(A0*A0*A0)/8.0/P1;

Y=R*A0;

REM M0 – positron mass, A0 – positron parameter, T9 – it kinetic energy

M0 = 1.0;

T9=(A0*A0)/8.0/M0;

Y0 = EXP (-Y);

REM N1 – електронна ємність, N2 – positron density, R3 – відповідна

A7=A3*(1.0/X-1.0/(X*X))-B3*(1.0/X+1.0/(X*X));

B7=A3*(1.0/X-2.0/(X*X)+2.0/(X*X*X))-

B3*(1.0/X+2.0/(X*X)+2.0/(X*X*X))-2.0*A3*X0/(X*X*X);

H3=R/5.0;

FOR R3=0 TO 4.0*R STEP H3;

```

IF R3>R goto 290;
D = D1;
GOTO 300;
D=0;
IF R3>=R GOTO 370;
IF R3>H3 GOTO 340;
F=4.0*P1*N0*(R*R)*(A7-A3/(X*X)*EXP(B0*R3-R));
GOTO 350;
F = 4.0 * P1 * N0 * (R * R) * (A7 + A3 * EXP (B0 * (R3-R)) *
*(-1.0/(X*X)+2*R/R3/(X*X*X))-2.0*A3*R/R3/(X*X*X)*X0);
N1 = N0 * A3 * EXP (B0 * (R3-R));
GOTO 390;
F = 4.0 * P1 * N0 * (R * R * R) / R3 * (B7 + B3 * EXP (B0 * (R-R3))
*(R3/R/(X*X)+2.0/(X*X*X)));
N1 = N0 * (1.0-B3 * EXP (B0 * (R-R3)));
N2=A9*EXP(-R3*A0);
REM R1 - rs electron, R2 - rs positron
R1=pow((4.0/3.0*P1*N1),(-1.0/3.0);
R2=pow((4.0/3.0*P1*N2),(-1.0/3.0);
IF N1>N2 GOTO 630;
X1=-4.0*P1/9.0*(R2*R2*R2*R2);
IF R1>6.0 GOTO 490;
L=-28.3225/pow((R2+5.0),2.0)+6.4466/(R2+5.0)-0.52548;
L1=(2.0*28.3225/POW((R2+5.0),3.0)-6.4466/pow((R2+5.0),2.0)*X1;
goto 530;
Y3 = 039145 * (R2-9.8);
T8=(EXP(2.0*Y3)-1.0)/(EXP(2.0*Y3)+1.0);
L=-0.307265-0.148162*T8;
L1=(0.148162*4.0*0.39145*(EXP(2.0*Y3)))/

```

```

/pow((EXP(2.0*Y3)+1.0),2.0)*X1;
A=-13.1511/pow((R2+2.5),2.0)+2.8655/(R2+2.5)-0.6298;
A1=(2.0+13.1511/pow((R2+2.5),3.0)-2.8655/pow((R2+2.5),2.0)*X1;
M=-0.10248+0.0066125*(R2-2);
M1 = 0.0066125 * X1;
B=1.0/N2*(3.0*L-2.0*AM);
B1=-1.0/(N2*N2)*(3.0*L-2.0*AM)+(3.0*L1-2.0*A1-M1)/N2;
C=1.0/(N2*N2)*(M+A-2.0*L);
C1=-2.0/(N2*N2*N2)*(M+A-2.0*L)+1.0/(N2*N2)*(M1+A1-2.0*L1);
V = N1 * (A1 + B1 * N1 + C1 * (N1 * N1)) * 0.5;
GOTO 740;
IF R1>6.0 GOTO 660;
L=-28.3225/pow((R1+5),2.0)+6.4466/(R1+5.0)-0.52548;
GOTO 690;
Y3 = 0.39145 * (R1-9.8);
T8=(EXP(2.0*Y3)-1.0)/(EXP(2.0*Y3)+1.0);
L=-0.307265-0.148162*T8;
A=-13.1511/pow((R1+2.5),2.0)+2.8655/(R1+2.5)-0.6298;
M=-0.10248+0.0066125*(R1-2.0);
B=1.0/N1*(3.0*L-2.0*AM);
C=1.0/(N1*N1)*(M+A-2*L);
V = ((A + B * N2 + C * (N2 * N2)) + N2 * (B +2.0 * N2 * C)) * 0.5;
W=-F+VD;
LPRINT R3, -F, V, W,
NEXT R3;

```

Додаток Б

Лістинг програми „Час життя позитрона у вакансіях металу”

```

P1 = 3.141593;
INPUT R0, N, A0, B0;
REM r – vacancy radia, r0 – rs.
NO=1.0/(4.0/3.0*P1*(R*R*R));
REM N – abs. atoms, Z – valenty, N*Z – number of absent elecrons.
Z=1;
R=R0*pow((N*Z),(1.0/3.0);
LPRINT R0, N, R, A0, B0;
X = R * B0;
X0 = EXP (-X);
B3=(0.5-1.0/X+1/(X*X)*(1.0-X0))/(1.0+2.0/(X*X)*(1.0-0.5*X0);
A3 = 1-B3;
L=-0.307265-0.148162*T8;
Y3 = 0.39145 * (R1-9.8);
A9=(A0*A0*A0)/8.0/P1;
REM M0 – positron mass, A0 – positron parameter
M0 = 1.0;
REM N1 – електронна ємність, N2 – positron density, R3 – відповідна
H3=1.0/B0/40.0;
L0 = 0;
A=1.58*1E-12.0;
FOR R3=0 TO 6*R STEP H3;
IFR3>R GOTO 250;
N1 = N0 * A3 * EXP (B0 * (R3-R));
GOTO 260;

```

```

N1 = N0 * (1.0-B3 * EXP (B0 * (R-R3)));
N2=A9*EXP(-R3*A0);
REM R1 - rs electron, R2 - rs positron
R1=pow((4.0/3.0*P1*N1),(-1.0/3.0);
R2=pow((4.0/3.0*P1*N2),(-1.0/3.0);
L=N1*N2*(1.0+((R1*R1*R1)+10.0)/6.0)*(R3*R3);
LO=LO+L+H3
REM T - positron life time (sec)
NEXT R3;
T=A/L0;
LPRINT T
END

```