

©1994

О ВЛИЯНИИ ВАКАНСИЙ НА РАБОТУ ВЫХОДА ПОЗИТРОНА И ПОЗИТРОНИЯ ИЗ МЕТАЛЛА

В.В.Погосов, И.Т.Якубов

Теоретически исследовано состояние позитрона в вакансии для некоторых простых, благородных и переходных металлов. В модели стабильного желе вычислены энергии связи позитрона в вакансии, а также работы выхода позитрона и позитрония. Расчеты показывают, что для металлов, обладающих отрицательными работами выхода нелокализованного позитрона, наличие вакансий в приповерхностной области приводит к изменению знака работ выхода.

Важной характеристикой состояния позитронов в металле является его работа выхода. Для ряда металлов работа выхода свободных позитронов W_p отрицательна. Этому соответствует наблюдаемая на опыте интенсивная обратная эмиссия инжектированных позитронов. Измерения времени жизни позитронов, потока вторичной эмиссии, работы выхода позволяют судить о дефектном состоянии вещества [1].

Позитрону, встретившемуся с вакансией, может быть энергетически выгодным локализоваться в ней [2]. Механизм резонансного рассеяния на моновакансиях обеспечивает очень высокие скорости захвата [3], что приводит, естественно, к увеличению времени его жизни в образце, которое наблюдается на опыте [4].

В работе [5] наблюдалось ослабление интенсивности позитронов, эмиттирующих в результате диффузии из алюминиевого образца, содержащего дефекты. Объяснением этого эффекта может быть изменение знака работы выхода позитрона вследствие его локализации в приповерхностной вакансии, откуда он туннельным переходом может оказаться уже в поверхностном состоянии и там аннигилировать.

Работа выхода локализованного в вакансии позитрона W_p^{vac} отличается от W_p на величину энергии связи позитрона в вакансии E_b

$$W_p^{\text{vac}} = W_p + E_b. \quad (1)$$

Если $W_p < 0$, то возможно изменение знака работы выхода, $W_p^{\text{vac}} > 0$. К числу металлов с отрицательными значениями W_p относятся, например, медь, алюминий, железо, молибден, никель, хром, титан. Для них в [6-10] из анализа энергетического спектра обратной эмиссии были получены значения W_p .

Одним из каналов фиксации обратной эмиссии позитронов служит регистрация «эмиссии» атомов позитрония. В работе [11] была доказана невозможность образования Ps в объеме металла. Атомы Ps

образуются на хвосте электронного распределения за поверхностью [12]. Работа выхода атома Ps зависит от того, свободен позитрон в металле (W_{ps}) или он локализован (W_{ps}^{vac})

$$W_{ps} = W_e + W_p - Ry/2,$$

$$W_{ps}^{\text{vac}} = W_{ps} + E_b, \quad (2)$$

где W_e — работа выхода электрона, $Ry = 13.6$ eV. С ростом температуры наблюдается уменьшение W_{ps} по абсолютной величине (см. [12,13] и содержащиеся там ссылки).

Как W_e , так и W_p является тензорной величиной, поскольку зависит от кристаллографического направления грани (см. обзор [14]).

Работа выхода позитрона может быть вычислена, если использовать метод функционала плотности. Его простейшая реализация дала хорошие результаты при расчете работы выхода электронов [15,16] и позитронов [17-21].

В данной статье мы сообщаем о вычислении работ выхода позитрона и позитрония, определенных как (1) и (2) для 11 металлов. Для этого впервые использована предложенная недавно форма записи функционала плотности [22], хорошо апробированная при расчетах различных свойств металлов.

1. Позитрон в моновакансии

Для вычисления работ выхода позитрона надо вычислить энергию металла с позитроном в вакансии $E_{\text{tot}}^{(1)}$, энергию металла с «пустой» вакансией и «свободным» позитроном $E_{\text{tot}}^{(2)}$ и энергию металлического образца и позитрона, находящегося вдали от него $E_{\text{tot}}^{(3)}$. Тогда

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

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

$$E_b = E_{\text{tot}}^{(2)} - E_{\text{tot}}^{(1)}. \quad (3)$$

Величину E_{tot} мы определяем как

$$E_{\text{tot}} = E_{sj} + E_p, \quad (4)$$

где E_s — энергия металла в модели стабильного желе, E_p — энергия позитрона. Удобно принять $E_p^{(3)} = 0$, если позитрон находится далеко вне металла. Тем самым выбран уровень отсчета энергии.

Величину E_{sj} удобно представить как

$$E_{sj} = E_{sj}^{\text{bulk}} + E_v, \quad (5)$$

где E_{sj}^{bulk} соответствует энергии «невозмущенного» металла, E_v — энергии вакансии. Тогда E_{sj}^{bulk} будет сокращаться во всех определениях (3).

Основному состоянию позитрона соответствует волновая функция, которую обозначим $\psi(r)$. Обозначая позитронное распределение как

$$n_p(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2, \quad \int d^3r n_p(\mathbf{r}) = 1, \quad (6)$$

величину E_p можно выразить следующим образом:

$$E_p = \int d^3r \left[-\varphi(\mathbf{r})n_p(\mathbf{r}) + E_{\text{corr}}^{e-p} [n_p(\mathbf{r}), n_e(\mathbf{r})] + E_0 \theta(r - R_v) \theta(R - r) n_p(\mathbf{r}) + t_p \right], \quad (7)$$

где первое слагаемое соответствует электростатическому взаимодействию позитрона с металлом E_q , второе слагаемое описывает вклад позитрон-электронных корреляций E_{corr}^{e-p} , а третье слагаемое — некулоновское позитрон-ионное взаимодействие в каждой из ячеек Вигнера-Зейтца, величина E_0 рассчитана в [17,18] в псевдопотенциальном приближении, четвертое слагаемое — кинетическая энергия позитрона ($T_p = \int d^3r t_p$),

$$t_p = (2m_p)^{-1} |\nabla\psi(\mathbf{r})|^2. \quad (8)$$

Когда позитрон свободен, т.е. находится в границах металлического образца, но вдали от вакансии, его волновая функция (в пределе $R \rightarrow \infty$) представляет собой плоскую волну. Так как объем вакансии несуществен по сравнению с объемом образца, первый интеграл в (7) равен величине электрического барьера на границе макроскопического образца D . В этом случае

$$E_p^{(2)} = D + E_{\text{corr}}^{e-p} [n_p^+, n_e^+] + E_0, \quad (9)$$

где n_e^+ — концентрация однородной электронной жидкости, $n_e^+ = 3/4\pi r_s^2 = k_F^3/3\pi^2$; n_p^+ — концентрация позитрона в однородной электронной жидкости, $n_p^+ = 3/4\pi R^3$. Выражение для корреляционной энергии одиночного позитрона в однородном электронном газе приведено в [23] для металлических плотностей n_e^+ . Таким образом, определение работы выхода W_p упрощается до

$$W_p = E_v^{(3)} - \left(E_v^{(2)} + E_p^{(2)} \right), \quad (10)$$

где энергия $E_v^{(3)} = E_v^{(2)}$ соответствует «пустой» вакансии.

Так как вакансия представляет собою полость, член E_0 как составляющая собственной энергии позитрона $E_p^{(1)}$ отсутствует. Корреляционный вклад

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

в энергию $E_p^{(1)}$ должен учитывать пространственное распределение позитрона и электронов в вакансии. В этом случае весьма удобной для практических целей является интерполяционная формула из [24] для корреляционного функционала в приближении локальной плотности, которое мы и используем в наших вычислениях.

2. Пустая вакансия

Предположим, что металлический образец имеет форму сферы радиуса R , в центре которой находится вакансия радиусом R_v . Величину R_v определим как радиус ячейки Вигнера-Зейтца, $R_v = Z^{1/3} r_s$, Z — валентность металла. Электронная жидкость находится в поле ионов, распределение которых жестко задано в виде

$$n_i(r) = \begin{cases} 0, & r \leq R_v, \\ n_e^+, & R_v \leq r \leq R, \\ 0, & r > R. \end{cases} \quad (11)$$

Энергия металла является функционалом неоднородной электронной плотности $n_e(r)$

$$E_{sj}[n_e(\mathbf{r})] = E_j[n_e(\mathbf{r})] + \Delta E[n_e(\mathbf{r})], \quad (12)$$

где энергия E_j записана в модели обычного (нестабильного) ионного желе. Известно, что в этой модели поверхность нестабильна при $r_s \leq 2a_0$. Поэтому (12) содержит корректирующий член, предложенный в [22]. В модели стабильного желе член ΔE приближенно учитывает энергию Маделунга ион-ионного взаимодействия (точечность ионов), исправляет взаимодействие электронов и ионов на малых расстояниях в приближении всеядопотенциала и устраняет самодействие положительного фона в ячейке Вигнера-Зейтца. Модель не учитывает зонные эффекты и релаксацию неоднородного распределения $n_i(r)$. От этих недостатков свободна двухкомпонентная модель, использованная нами в [25] (рассчитанная в ее рамках температурная зависимость W_e для щелочных металлов экспериментально подтверждена в [26]). Однако реализация двухкомпонентной модели весьма трудоемка.

Энергия в приближении желе записывается в обычном виде

$$E_j = E_{xc} + T_e + E_g. \quad (13)$$

Обменно-корреляционная энергия электронной жидкости представлена в приближении локальной плотности (атомная система единиц, $\epsilon = m_e = \hbar = 1$)

$$E_{xc} = \int d^3r \epsilon_{xc}(n_e(\mathbf{r})) n_e(\mathbf{r}),$$

$$\epsilon_{xc} = -(3/4\pi) (3\pi^2 n_e)^{1/3} - 0.0474 - 0.0155 \ln (3\pi^2 n_e)^{1/3}. \quad (14)$$

Полагая изменения электронной плотности вблизи границы плавными, функционал кинетической энергии можно представить в градиентном приближении

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

$$\times n_e^{1/3} \left[\left(\frac{\nabla n_e}{n} \right)^2 - \frac{9}{8} \left(\frac{\nabla n_e}{n} \right) \left| \frac{\nabla n_e}{n} \right|^2 + \frac{1}{3} \left| \frac{\nabla n_e}{n} \right|^4 \right] \}. \quad (15)$$

Кулоновская компонента полной энергии имеет вид

$$E_q^{e-i-e} = (1/2) \int d^3 r \varphi(\mathbf{r}) [n_e(\mathbf{r}) - n_i(\mathbf{r})],$$

$$\varphi(r) = \int d^3 r' [n_e(r') - n_i(r')] |r - r'|^{-1}, \quad (16)$$

где $\varphi(r)$ — электростатический потенциал.

Наконец, согласно [22],

$$\Delta E = (C/n_e^+) \int d^3 r n_i(\mathbf{r}) [n_e(\mathbf{r}) - n_i(\mathbf{r})],$$

$$C = -k_F^2/5 + k_F/4\pi + 0.0155/3. \quad (17)$$

Минимальному значению полной энергии E_{sj} металла, содержащего вакансию, соответствует оптимальный электронный профиль $n_e(\mathbf{r})$, удовлетворяющий условию

$$\delta E_{sj} = 0. \quad (18)$$

Энергия, требуемая на образование вакансии, равна разности энергий неоднородного и однородного металла

$$E_v = E_{sj} [n_e(r)] - E_{sj} [n_e^+ \theta(r - R_v)], \quad (19)$$

где $\theta(r)$ — единичная ступенька Хевисайда. Вид $n_e(r)$ и величина E_v зависят от того, является ли вакансия «пустой» или «возмущенной» локализованным в ней позитроном.

Работа выхода электронов может быть выражена суммой объемной и поверхностной компонент модели обычного желе и поправки на стабилизацию ΔW

$$W_e = W_j + \Delta W, \quad (20)$$

где

$$W_j = -\varepsilon_e - \varphi(0).$$

Здесь ε_e — энергия на один электрон в однородном желе

$$\varepsilon_e = -(3/10)k_F^2 + (3/4\pi)k_F + 0.0474 + 0.0155 \ln k_F,$$

а $\varphi(0)$ — значение электрического потенциала на плоской поверхности, т.е. это либо $\varphi(r)|_{r=R_v \rightarrow \infty}$, либо $\varphi(r)|_{r=R \rightarrow \infty}$. Поправка ΔW имеет вид

$$\Delta W = (C/n_e^+) \int_{-\infty}^0 dx [dn_e(x)/dx]. \quad (21)$$

Здесь ось x перпендикулярна поверхности, $x = r - R$ при условии $R \rightarrow \infty$.

3. Вариационные вычисления и обсуждение полученных результатов

Не решая соответствующего уравнения Эйлера для электронного распределения $n_e(r)$, зададим $n_e(r)$ в параметризованном виде

$$n_e(r) = n_e^+ \begin{cases} Ae^{b(r-R_v)}, & r < R_v, \\ 1 - Be^{b(R_v-r)}, & r > R_v, \end{cases} \quad (22)$$

где b — параметр, величина которого будет найдена в результате минимизации (18). Из условия сохранения полного числа электронов и условия сшивки в $r = R_v$ следует соотношение между A и B . В пределе $R_v \rightarrow \infty$ кривая поверхность переходит в плоскую, тогда $A = B = 1/2$. Аналогично описывается и «внешняя» поверхность металлического образца.

Определив $E_v \equiv 4\pi R_v^2 \sigma(R_v)$, условие минимума энергии (18) можно записать в виде

$$d\sigma(n_e^+, b, R_v) / db = 0. \quad (23)$$

Простой вид пробной функции (22) позволяет записать $\sigma(R_v)$ в аналитическом виде и легко провести минимизацию, определив оптимальную величину параметров.

На этом этапе можно провести тестирование модели металла, вычислив значения работы образования вакансии E_v , удельной поверхностной энергии $\sigma_\infty \equiv \sigma(R_v \rightarrow \infty)$ и работы выхода электронов W_e для плоской поверхности. «Поверхностную энергию» вакансии $\sigma(R_v)$ можно, по-видимому, аппроксимировать формулой [27]

$$\sigma(R_v) = \sigma_\infty - \sigma_1/R_v \quad (24)$$

для поверхности отрицательной кривизны ($-1/R_v$). Величина σ_1 вычислялась неоднократно [27–29].

Интегрирование в (16) и (21) для функции (22) дает

$$\varphi(x) = -4\pi n_e^+ b_\infty^{-2} \begin{cases} 1 - \frac{1}{2}e^{b_\infty x}, & x < 0, \\ \frac{1}{2}e^{-b_\infty x}, & x > 0, \end{cases}$$

$$\Delta W = -C/2. \quad (25)$$

В этом случае величина поверхностного барьера равна

$$D = 4\pi n_e^+ b_\infty^{-2} = -2\varphi(0), \quad (26)$$

где величина параметра b_∞ соответствует плоской поверхности.

В табл. 1 приведены данные вычислений. Расчетные значения работы выхода электронов W_e для плоской поверхности являются монотонно убывающими функциями r_s и хорошо согласуются с результатами работы [22] для простых металлов (от Na до Al). Для сравнения

Таблица 1

Данные вычислений оптимальных вариационных параметров b , b_∞ , энергии образования вакансий E_v , величина электростатического барьера для плоской поверхности D и работы выхода электронов W_e

Z	Металл	r_s, a_0	b, a_0^{-1}	E_v, eV		b_∞, a_0^{-1}	D, eV	W_e, eV	
				τ	ϑ [30]			τ	ϑ [31]
1	Na	3.93	0.80	0.44	0.42	0.98	1.40	2.96	2.35
1	Au	3.01	0.97	0.53	0.89	1.15	2.26	3.40	4.30
1	Ag	3.02	0.97	0.53	1.11	1.15	2.24	3.39	4.30
1	Cu	2.67	1.06	0.58	1.28	1.24	2.79	3.55	4.40
2	Mg	2.65	1.11	0.94	0.90	1.24	2.85	3.57	3.64
3	Al	2.07	1.34	1.31	0.66	1.44	4.44	3.75	4.25
4	Pb	2.30	1.26	1.59	0.56	1.35	3.68	3.71	4.00
1	Mo	3.20	0.93	0.51		1.11	2.02	3.30	4.30
2	Fe	2.12	1.30	1.01	1.60	1.42	4.25	3.74	4.31
2	Ni	2.72	1.09	0.93		1.22	2.73	3.54	4.50
1	Cr	2.61	1.08	0.59		1.25	2.94	3.60	4.58

в табл. 1 приведены рекомендуемые в книге [30] значения W_e для поликристаллических образцов.

Величина параметра $b(R)$ для поверхности отрицательной кривизны (вакансии) меньше, чем в плоском случае. Противоположная зависимость $b(R)$ имеет место для положительной кривизны, что, к примеру, моделирует малую сферическую частицу [28]. В нашей простой модели величина энергии образования вакансии определяется кривизной ее поверхности и сложным образом зависит от произведения $Z^{1/3}r_s$. В целом для простых металлов E_v также является монотонной функцией r_s и для щелочных металлов наблюдается неплохое согласие с экспериментальными данными, взятыми нами из коллекции [31]. Мы провели тестирование вычислений E_v для Na ($r_s = 4a_0$) путем сравнения с величиной $E_v = 4\pi R_v^2(\sigma_\infty - \sigma_1/R_v)$, где σ_∞ и σ_1 вычислены нами ранее в модели обычного желе [28], т.е. когда в функционале (12) отсутствуют ΔE и второй градиентный член в T_e . На возможность такой процедуры указано в [22]: при $r_s = 4a_0$ модели стабильного и обычного желе дают близкие результаты для случая плоской поверхности. Для Na величина $E_v = 0.28 eV$ несколько меньше $E_v = 0.44 eV$ из табл. 1. В частности, это указывает на сильное влияние дополнительных градиентов в энергетическом функционале стабильного желе для кривой поверхности. Причины такого влияния заключаются в экспоненциальном (слишком резком) характере спада электронного профиля в глубь вакансии. Это подтверждает сравнение значений нашей электронной плотности и кон-шэмовских значений [24] в центре вакансии алюминия, $n_e(0)/n_e^{KS}(0) \approx 1/6$. Таким образом, на малых расстояниях происходит значительный перепад концентрации электронов, что и приводит в некоторых случаях к слишком завышенному значению E_v . С другой стороны, вычисляемые значения E_v также чувствительны и

к способу описания однородного металла, например в одном из вариантов ков-шемовских вычислений в [32] $E_v = 0.54, 0.59, 1.03, 2.35$ eV для Na, Li, Al, Pb соответственно.

Следует отметить, что в данном статистическом типе функционала не учитывается ряд особенностей металлов. Учет несферичности поверхности Ферми и зонных эффектов (особенно для Pb), энергии s - d -гибридизации (для переходных металлов), релаксации поверхностных слоев, коррекции приближения локальной плотности обменно-корреляционных эффектов в электронной жидкости, степени самосогласования поверхности потенциального профиля может иметь сравнительный эффект и значительно повлиять на вычисляемую характеристику.

Допустим, что основное состояние локализованного в вакансии позитрона описывается параметризованной волновой функцией

$$\psi(r) = (a^3/8\pi)^{1/2} \exp(-ar/2). \quad (27)$$

Тогда энергия нулевых колебаний позитрона $T_p^{(1)} = a^2/8m_p$ (мы приняли $m_p = 1$). Распределение электронов внутри и в окрестности вакансии задается, как и ранее, в виде (22).

В присутствии позитрона в вакансии оптимальные профили $n_e(r)$ и $n_p(r)$ определяются из условий

$$dE_{\text{tot}}^{(1)}/db = 0, \quad dE_{\text{tot}}^{(1)}/da = 0, \quad (28)$$

где $E_{\text{tot}}^{(1)} \equiv E_{\text{tot}}^{(1)}(n_e^+, a, b)$, причем «новые» значения b будут отличаться от тех, которые найдены для пустой вакансии, когда позитрон локализован, т.е. находится вдали от ямы. В выражении для полной энергии $E_{\text{tot}}^{(1)}$ от параметров a и b зависит только та ее часть, которая соответствует области неоднородности металла (вакансии) и энергии позитрона. Эта же часть будет присутствовать при нахождении энергии связи позитрона в вакансии по определению (19)

$$E_b = \left(E_v^{(2)} + E_p^{(2)} \right) - \left(E_v^{(1)} + E_p^{(1)} \right). \quad (29)$$

В табл. 2 приведены результаты вычислений работ выхода свободного позитрона W_p и W_{ps} . Работа выхода W_p , складывается из нескольких членов, разных по знаку и для некоторых металлов, близких по величине, и поэтому весьма чувствительна к вычислению каждой из них. Это хорошо видно на примерах Au и Cu при использовании различных оценок E_0 . Упрощенное описание электронного профиля вблизи границ металла также приводит к погрешностям в вычислении D . В целом, однако, достигнуто согласие по знаку теоретических значений W_p с имеющимися для некоторых металлов экспериментальными данными.

Работа выхода позитрония W_{ps} не зависит от величины поверхностного барьера и целиком определяется объемными свойствами металла. Поэтому наблюдается согласие с опытными данными не только по знаку, но и по величине.

Работы выхода позитрона W_p , атома позитрона $W_{p,s}$ и их компонент для некоторых бездефектных металлов

Металл	$-E_{\text{согг}}^{(2)}, \text{eV}$	E_0, eV	W_p, eV		$W_{p,s}, \text{eV}$	
			τ	ε	τ	ε
Na	6.83	1.77 [17]	3.66		-0.18	
Au	7.39	5.3 [18]	-0.17	>0 (100) [10]	-3.57	-2.24 (100) [10]
		4.63 [17]	0.50		-2.89	
Ag	7.38	4.5 [18]	0.64	>0 (100) [8,9]	-2.77	
		4.22 [17]	0.92		-2.49	
Cu	7.72	4.9 [18]	0.03	-0.6 (поли) [6,7]	-3.22	-2.50 (поли) [33]
		4.22 [17]	0.17		-2.54	
Mg	7.74	3.13 [17]	1.76		-1.46	
Al	8.60	4.76 [17]	-0.60	-0.19 (поли) [8,9]	-3.65	-2.78 (поли) [33]
Pb	8.21	4.35 [17]	0.18	>0 (100) [8,9]	-2.91	-0.73 (поли) [33]
Mo	7.24	6.0 [18]	-0.78	-2.4 (поли) [7]	-4.28	
Fe	8.51	5.7 [18]	-1.44	-1.3 (поли) [7]	-4.49	
Ni	7.67	5.3 [18]	-0.36	-0.9 (поли) [7]	-3.61	-2.63 ⁹ (поли) [33]
Cr	7.79	6.3 [18]	-1.45	-1.76 (100) [8,9]	-4.65	

В табл. 3 представлены результаты расчетов энергии связи позитрона E_b моновakanсии и соответствующих работ выхода W_p^{vac} и W_{ps}^{vac} ; для полноты анализа приведены также величины некоторых их компонент. Как следует из табл. 3, локализованный позитрон стимулирует дополнительные «затекания» электронной жидкости внутрь вакансии (уменьшается параметр b), тем самым как бы увеличивая энергию образования вакансии, поэтому $E_v^{(2)} > E_v^{(1)} = E_v^{(3)}$. Сравнивая значения W_p (табл. 2) и W^{vac} (табл. 3), наблюдаем изменение знака работы выхода позитрона при его эмиссии из вакансии для металлов, имеющих $W_0 < 0$. Для этих металлов мы получили $E_b > |W|_p$. Для атомов позитрона наблюдается $W_{ps} < 0$, $W_{ps}^{\text{vac}} > 0$ для всех исследованных металлов.

Для проверки точности вариационных расчетов они были повторены с волновой функцией позитрона осцилляторного вида

$$\psi(r) = a^{3/2} \pi^{-3/4} \exp(-a^2 r^2 / 2). \quad (30)$$

Вычисления для вакансии в алюминии дали $E_b = 3.95 \text{ eV}$, что указывает на малую чувствительность задачи к виду $\psi(r)$.

Время жизни позитрона в вакансии обратно пропорционально скорости аннигиляции λ . Мы воспользовались общепринятым способом вычисления λ

$$\lambda = \pi r_0^2 c \int d^3 r n_e(r) n_p(r) \Gamma(n_e(r)), \quad (31)$$

Оптимальные величины параметров a и b , энергия связи позитрона в моновакансии E_b , а также величины W_p^{vac} и $W_{p,s}^{\text{vac}}$ и некоторые из их компонент

Металл	a, a_0^{-1}	b, a_0^{-1}	$E_v^{(1)}$	$E_q^{(1)}$	$-E_{\text{согр}}^{(1)}$	E_b	W_p^{vac}	$W_{p,s}^{\text{vac}}$
Na	0.30	0.53	0.59	0.99	6.21	1.11	4.77	0.93
Au	0.38	0.71	0.67	1.76	6.67	4.45	4.28	0.88
						3.78	4.28	0.88
Ag	0.38	0.67	0.72	1.70	6.67	3.65	4.29	0.88
						3.37	4.29	0.88
Cu	0.42	0.80	0.71	2.26	6.96	3.95	3.88	0.73
						3.27	3.98	0.73
Mg	0.36	0.91	1.04	2.31	7.10	2.50	4.26	1.04
Al	0.41	1.14	1.44	3.65	7.92	4.15	3.55	0.50
Pb	0.35	1.12	1.66	3.02	7.58	3.89	4.07	0.98
Mo	0.34	0.89	0.51	1.76	6.49	5.12	4.34	0.84
Fe	0.42	1.14	1.07	3.66	7.78	4.91	3.47	0.41
Ni	0.35	0.90	1.02	2.21	7.03	4.68	4.32	1.07
Cr	0.42	0.81	0.73	2.40	7.02	5.33	3.88	0.65

где

$$\Gamma(n_e(r)) = 1 + \left[10 + 3/4\pi n_e(r) \right] / 6$$

— фактор усиления [34] для позитрона в квазиоднородном электронном газе плотностью $n_e(r)$, r_0 — классический радиус электрона, c — скорость света. Более сложная, с вычислительной точки зрения, интерполяционная схема в [24] для Γ приводит к незначительной коррекции величин, рассчитанных по формуле (31). В качестве примера приведем значения $\tau = 414$ ns в Na и 196 ns в Al, рассчитанные с функцией (27). Эти значения близки к результатам в [24]. В виде теста мы приводим также значение $\tau = 186$ ns для Al, полученное нами при использовании пробной функции (30). Для переходных металлов формула (31) должна быть изменена в соответствии с возможностью позитрона аннигилировать с электронами внутренних оболочек ионов [35].

Во всех работах по исследованию позитронов в вакансиях предполагается, что ионная подсистема жесткая, т.е. не поддается деформации. Сделаем оценки возможности деформирования позитроном стенок вакансии. По определению, модуль сжатия K в конденсированной среде

$$K^{-1} = V^{-1} \partial V / \partial P.$$

Тогда давление позитрона на стенки вакансии приводит к изменению радиуса на ΔR_v , даваемому следующим выражением:

$$\Delta R_v / R_v = P / 3K. \quad (32)$$

С другой стороны,

$$P = F/4\pi R_v^2, \quad (33)$$

где сила $F = -dT_p/dL$. В случае пробной функции (27) $L = 1/a$, $T_p = 1/8L^2$ и

$$\Delta R_v = a^3/(48\pi R_v K). \quad (34)$$

Для алюминия и натрия $\Delta R_v = 0.06$ и $0.19a_0$ соответственно. Величина ΔR_v чувствительна к способу описания позитрона в металле и необходимо более аккуратное задание $n_p(r)$, поэтому вопрос о деформации требует дополнительного исследования. В этой связи интересна работа [36], в которой учтена релаксация атомов вблизи пустой вакансии в молибдене, в которую помещался затем позитрон. Учет этого эффекта изменил энергию связи позитрона от 3.44 до 2.38 eV.

Список литературы

- [1] Schultz P.J., Lynn K.G. // *Rev. Mod. Phys.* 1988. V. 60. N 1. P. 3-77.
- [2] Гольтяев О.М., Осадчиев В.М. // *ФТТ.* 1984. Т. 26. № 6. С. 1801-1807; Trumphy G., Bentzon M.D. // *J. Phys.: Cond. Matter.* 1992. V. 4. N 2. P. 419-426; Gramsch E., Lynn K.G. // *Phys. Rev. B.* 1989. V. 40. N 4. P. 2537-2549.
- [3] McMullen T., Stott M.J. // *Phys. Rev. B.* 1986. V. 34. N 12. P. 8985-8988; 1990. V. 42. P. 1910-19; Puska M.J., Manninen M. // *J. Phys. F: Met. Phys.* 1987. V. 17. P. 2235-2248; Jensen K.O., Walker A.B. // *J. Phys.: Condens. Matter.* 1992. V. 4. P. 1973-1980.
- [4] Seeger A., Banhart F. // *Phys. Stat. Sol. (a).* 1987. V. 102. N 1. P. 171-179.
- [5] Nielsen B., Lynn K.G., Chen Y.-C. // *Phys. Rev. Lett.* 1986. V. 57. N 14. P. 1789-1792.
- [6] Fischer D.A., Lynn K.G., Gidley D.W. // *Phys. Rev. B.* 1986. V. 33. N 7. P. 4479-4492.
- [7] Jibaly M., Kaymen A.R., Chun L., Mehl D., Weiss A. // *Positron Annihilation / Ed. Zs. Kajcsos and Cs. Szeles. Material Science Forum.* 1992. V. 105-110. Pt. 3. (Aedermannsdorf-Switzelend: Trans Tech Publications). P. 1399.
- [8] Mills A.P. // *Positron Solid State Physics / Ed. W. Brandt and A. Dupasquier. Amsterdam: North-Holland, 1983. P. 432-473.*
- [9] Huomo H., Vehanen A., Bentzon M.D., Hautojarvi P. // *Phys. Rev. B.* 1987. V. 35. N 15. P. 8252-8255.
- [10] Mills A.P., Pfeiffer Jr.L., Platzman P.M. // *Phys. Rev. Lett.* 1983. V. 51. N 7. P. 1085-1088.
- [11] Hodges C.H., Trinkaus H. // *Sol. St. Commun.* 1976. V. 18. N 7. P. 857-860.
- [12] Rosenberg I.J., Howell P.H., Fluss M.J. // *Phys. Rev. B.* 1987. V. 35. N 4. P. 2083-2086.
- [13] Huttunen P.A., Mäkinen J., Britton D.T., Soininen E., Vehanen A. // *Phys. Rev. B.* 1990. V. 42. N 3. P. 1560-1573.
- [14] Smith J.R. // *Phys. Rev.* 1969. V. 181. N 2. P. 522-529.
- [15] Lang N.D., Kohn W. // *Phys. Rev. B.* 1970. V. 1. N 12. P. 4555-4568.
- [16] Tong B.Y. // *Phys. Rev. B.* 1972. V. 5. N 3. P. 1436-1440.
- [17] Hodges C.H., Stott M.J. // *Phys. Rev. B.* 1973. V. 7. N 1. P. 73-79.
- [18] Nieminen R.M., Hodges C.H. // *Sol. St. Commun.* 1976. V. 18. N 8. P. 1115-1118.
- [19] Fletcher G., Fry J.L., Pattnaik P.C. // *Phys. Rev. B.* 1983. V. 27. N 7. P. 3987-3991.
- [20] Boev O.V., Puska M.J., Nieminen R.M. // *Phys. Rev. B.* 1987. V. 36. N 15. P. 7786-7794.
- [21] Kiejna A. // *Prog. Surf. Sci.* 1981. V. 11. N 4. P. 293-338.
- [22] Perdew J.P., Tran H.Q., Smith E.D. // *Phys. Rev. B.* 1990. V. 42. N 18. P. 11627-11636.
- [23] Arponen J., Pajanne E. // *Ann. Phys. (N.Y.).* 1979. V. 121. N 1. P. 343-350.
- [24] Boronski E., Nieminen R.M. // *Phys. Rev. B.* 1986. V. 34. N 6. P. 3820-3831.
- [25] Iakubov I.T., Khrapak A.G., Pogosov V., Trigger S.A. // *Sol. St. Commun.* 1986. V. 60. N 4. P. 377-380; *Phys. Stat. Sol. (b).* 1988. V. 145. N 2. P. 455-465.
- [26] Алчагиров Б.Б., Архестов Р.Х., Хоконов Х.Б. // *Журнал физич. химии.* 1993. Т. 67. № 9. С. 1892-1895.
- [27] Perdew J.P., Wang Y., Engel E. // *Phys. Rev. Lett.* 1991. V. 66. N 4. P. 508-511; Fiolhais C., Perdew J.P. // *Phys. Rev.* 1992. V. B45. P. 6207-6215.

- [28] Iakubov I.T., Khrapak A.G., Podlybny L.I., Pogosov V.V. // Sol. St. Commun. 1985. V. 53. N 4. P. 427-430; Погосов В.В. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 8. С. 2310-3213; Sol. St. Commun. 1990. V. 75. N 5. P. 469-472. ФТТ. 1993. Т. 35. № 4. С. 1010-1021.
- [29] Perdew J.P., Ziesche P., Fiolhais C. // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. N 24. P. 16460-16463.
- [30] Фоменко В.С. Эмиссионные свойства химических элементов. Киев.: Наукова думка, 1980. 339 с.
- [31] Орлов А.Н., Трушин Ю.В. Энергии точечных дефектов. М.: Энергоатомиздат, 1983. 81 с.
- [32] Mäntinen M., Nieminen R.M. // J. Phys. F: Met. Phys. 1978. V. 8. N 11. P. 2243-2260.
- [33] Howell R.H., Rosenberg I.J., Fluss M.J., Golberg R.E., Loughlin R.B. // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 10. P. 5303-5306.
- [34] Brandt W., Reinheimer J. // Phys. Lett. 1971. V. A35. N 1. P. 109-112.
- [35] Puska M.J. // J. Phys.: Condens. Matter. 1991. V. 3. P. 3455-3469.
- [36] Khanna S.N., Rao B.K., Jena P., Esterling D., Puska M.J. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. N 1. P. 6-11.

Институт высоких температур РАН
Москва

Поступило в Редакцию
1 февраля 1994 г.