

## ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОЙ МАССЫ ПОЗИТРОНИЯ В ГИДРИДЕ ЛИТИЯ

© Р.Х. Сабиров

Московский педагогический государственный университет,  
119882 Москва, Россия  
(Поступила в Редакцию 27 марта 1996 г.)

В [1] исследован вопрос о возможных пределах изменения эффективной массы позитрония, точнее говоря, позитронийподобного состояния в щелочно-галогидных кристаллах. При этом найдено, что экспериментальные значения эффективных масс не могут быть объяснены в рамках модели потенциала точечных ионов. Однако экспериментальные значения эффективных масс позитрония в этих кристаллах находятся в согласии с дублонной моделью [2,3] образования связанного состояния позитрона и электрона в ионных кристаллах. В связи с этим было бы желательно провести расчет эффективной массы позитрония в ионном кристалле с более реалистичным ионным потенциалом, чем потенциал точечных зарядов. Такой расчет помог бы нам сделать выбор в пользу конкретной модели образования связанного позитрон-электронного состояния в ионном кристалле.

Проведем расчет эффективной массы позитрония в кристалле LiH, для которого в [4] предложены ионные потенциалы

$$v_1(R) = (e/R) + (2e/R) \exp(-\alpha R), \quad \alpha = 4.152 \text{ \AA}^{-1}, \quad (1)$$

$$v_2(R) = (2e/R) \exp(-\beta R) - (e/R), \quad \beta = 1.715 \text{ \AA}^{-1} \quad (2)$$

для ионов лития и водорода соответственно. Здесь  $e$  — заряд протона,  $R$  — расстояние от иона. В случае  $\alpha = \beta = 0$  мы приходим к модели точечных зарядов. Используя потенциалы (1) и (2), можно повторить расчет работы [1]. Однако при этом необходимо использовать новый (в соответствии с приближениями (1) и (2)) вид Фурье-компонент  $V_g$  кристаллического потенциала. Согласно [4], имеем

$$V_g = \frac{2\pi e}{d^3} \left\{ \frac{2}{g^2 + \alpha^2} + \frac{1}{g^2} + (-1)^{n_1+n_2+n_3} \left[ \frac{2}{g^2 + \beta^2} - \frac{1}{g^2} \right] \right\}, \quad (3)$$

где  $d$  — наименьшее расстояние между анионом и катионом в кристалле со структурой NaCl,  $n_1, n_2, n_3$  — целые числа, причем их сумма  $n_1 + n_2 + n_3$  есть нечетное число,  $g$  — модуль вектора обратной решетки.

Кристалл	$d, \text{Å}$	$M/2m_0$		
		min	max	Эксперимент [5]
NaF	2.317	1.151	1.216	$1.50 \pm 0.20$
NaCl	2.820	1.118	1.183	$1.37 \pm 0.20$
NaBr	2.989	1.106	1.168	$1.90 \pm 0.50$
KCl	3.147	1.096	1.155	$1.56 \pm 0.15$
KBr	3.298	1.087	1.142	$1.36 \pm 0.15$
KI	3.533	1.073	1.123	$1.98 \pm 0.10$
PbCl	3.291	1.088	1.143	$1.90 \pm 0.40$

Принимая во внимание результаты работы [4], легко установить, что в приближении (3).

$$1.067 > M/2m_0 > 1.051. \quad (4)$$

Здесь  $M$  — эффективная масса позитрония в LiH,  $m_0$  — масса электрона. В расчете принято  $d = 2.0465 \text{Å}$ . В то же время приближение потенциала точечных ионов ( $\alpha = \beta = 0$ ) дает

$$1.221 > M/2m_0 > 1.165. \quad (5)$$

Таким образом, учет поляризуемости ионов приводит к заметному снижению границы для отношения  $M/2m_0$  сверху. Обусловлено это тем, что для LiH выполняется условие  $\alpha > \beta$ . В случае  $\alpha < \beta$  наблюдался бы обратный эффект. К сожалению, нам неизвестны экспериментальные значения эффективной массы позитрония в LiH, что не позволяет провести сравнение расчета с экспериментом. Отметим, что мы провели усреднение  $M$  по трем ориентациям ([100], [110] и [111]) направления квазиимпульса позитрония, хотя эффект анизотропии и ничтожен.

Если допустить, что и в щелочно-галогидных кристаллах наблюдается аналогичная тенденция, то это только усилит заключение работы [1] о невозможности согласовать экспериментальные данные по эффективной массе с позитрониевой моделью образования связанного состояния позитрона и электрона в данных кристаллах. Здесь следует обратить внимание на следующее. В [1], к сожалению, допущена ошибка при численных оценках: рассчитанные значения величин  $\tilde{\gamma}$  и  $\gamma^*$  (обозначения по [1]) взяты в 16 раз меньше их точных значений. Это привело к заниженным оценкам отношения  $M/2m_0$ . В связи с этим приведем точные данные хотя бы для тех кристаллов, где возможно сравнение с экспериментом. Эти данные приведены в таблице, из которой видно, что экспериментальные значения отношения  $M/2m_0$  превышают их теоретически возможные значения.

Нам представляется, что дублонная модель образования позитрон-электронного связанного состояния для щелочно-галогидных кристаллов является более предпочтительной, чем позитрониевая — образование связанного состояния позитрона и электрона за счет их кулоновского взаимодействия в междоузельном пространстве.

## Список литературы

- [1] Р.Х. Сабиров. ФТТ **37**, 10, 2909 (1995).
- [2] Р.Х. Сабиров. Acta Phys. Pol. **A60**, 4, 483 (1981).
- [3] М.Л. Москвитин, Р.Х. Сабиров. ФТТ **32**, 4, 966 (1990).
- [4] S.M. Neamten, R.J. Verrall. Phys. Rev. **134A**, 5, 1254 (1964).
- [5] J. Kasai, T. Hyodo, R. Fuiwara. Proc. 7th. Int. Conf. Pos. Ann. New Delhi. Singapore (1981). P. 779.