

УДК 539.124

© 1990

ЗАТУХАНИЕ И ПОТЕРИ ЭНЕРГИИ АВТОЛОКАЛИЗОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ПОЗИТРОНА В ПРОСТЫХ МЕТАЛЛАХ

В. И. Мешакин, В. М. Осадчиев

Показано, что основным механизмом потерь энергии автолокализованным состоянием позитрона является возбуждение электрон-дырочных пар. Автолокализация существенно меняет интерпретацию опытов по термализации позитронов. Предложен новый метод обработки опытов по термализации.

В экспериментальном исследовании электрон-позитронной аннигиляции используют β^+ источники с кинетической энергией позитронов 1 МэВ. Попадая в металл, высокоэнергетический позитрон теряет энергию, взаимодействуя с электронами и ионами. За время $t \sim 10^{-11}$ с, малое по сравнению со временем жизни $\tau \sim 10^{-10}$ с, позитрон сбрасывает энергию до значения $\epsilon \sim 0.1$ эВ и основной вклад во время термализации (время релаксации к равновесному состоянию) набирается в области малых энергий, близких к тепловым. Экспериментально установлено, что при низких температурах ≈ 100 К позитрон аннигилирует, не успев термализоваться [1, 2].

Существующее теоретическое описание процесса потерь энергии позитрона при рассеянии на электронах [3] и фононах [4, 5] основано на предположении о делокализованном состоянии во всем интервале энергий. При этом оказывается, что в области низких температур основным механизмом затухания и потерь энергии является рассеяние на фононах [4, 5]. Сравнение с экспериментом показывает, что теоретическое значение характерной температуры, когда начинают проявляться эффекты нетермализации позитрона, оказывается гораздо ниже соответствующей экспериментальной величины [1, 2]. Несоответствие теоретического и экспериментального значений характерной температуры нетермализации свидетельствует о завышении константы позитрон-фононного взаимодействия в теоретических моделях. Оставаясь в рамках делокализованного состояния, понизить позитрон-фононное взаимодействие не удастся.

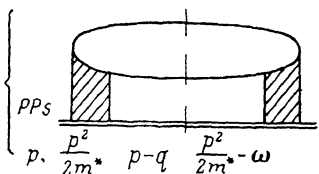
На самом деле, достигнув энергий $\epsilon \sim 1$ эВ, позитрон автолокализуется в электронном газе простых металлов [6], обрстая электронной шубой, в результате чего образуется новая квазичастица — псевдопозитроний (*PPs*). Характерная особенность *PPs* состоит в том, что выполняется условие электронейтральности и, кроме того, профили плотностей распределения положительного и отрицательного зарядов оказываются близкими, вследствие чего квазичастица является почти локально-электронейтральной. Учет нелинейного экранирования приводит к ослаблению взаимодействия позитрона с электронами и фононами.

В настоящей работе получены выражения для электронных и фононных потерь энергии и затухания поступательного движения *PPs*, из которых следует, что электронные потери доминируют над фононными. Получены выражения для температур нетермализации моментов функции распределения позитронов $f(p, t)$. В результате анализа традиционного метода

обработке опытов по термализации выяснено, что метод неадекватен определению термализации средней энергии PPs . Проведенные исследования показали, что в наблюдаемые температурные зависимости характеристик угловых корреляций аннигиляционных квантов входит эффективная функция распределения позитронов по импульсам $F(\mathbf{p})$, обладающая универсальным далекодействующим хвостом, которая является результатом усреднения функции $f(\mathbf{p}, t)$ с учетом конечного времени жизни позитрона. Полученное уравнение для $F(\mathbf{p})$ позволяет предложить новый метод обработки опытов по термализации. В работе используется система единиц $\hbar=c=1$.

1. Электронные потери энергии автолокализованного позитрона

В модели желе металла поступательное движение центра инерции PPs описывается плоской волной, а внутреннее состояние в системе покоя — распределением позитронной плотности $\rho_+(\mathbf{r})$ и возмущением электронной плотности $\delta\rho(\mathbf{r})$ ($\int d^3r\rho_+ = \int d^3r\delta\rho = 1$). Затухание поступательного движения PPs с импульсом центра инерции \mathbf{p} имеет вид [7]

$$\chi_e(p) = -\text{Im} \left\{ \begin{array}{c} \text{PPs} \\ p, \frac{p^2}{2m^*} \quad p-q \quad \frac{p^2}{2m^*} - \omega \end{array} \right\} =$$


$$= -\pi \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} |\tilde{f}(\mathbf{q}, \omega)|^2 \text{Im} \Pi(\mathbf{q}, \omega, T) \delta \left[\frac{p^2}{2m^*} - \omega - \frac{(\mathbf{p}-\mathbf{q})^2}{2m^*} \right]. \quad (1)$$

Заштрихованный блок $\tilde{f}(\mathbf{q}, \omega)$ означает амплитуду (e^- , PPs) взаимодействия; $\Pi(\mathbf{q}, \omega, T)$ — поляризационный оператор электронов при температуре T . Эффективная масса PPs близка к массе свободного электрона $m^* \simeq m$ [8]. Учитывая, что характерные импульсы и энергии в задаче малы

$$q \sim p \ll p_F, \quad \omega \ll p^2/2m^* \ll qv_F \ll \varepsilon_F, \quad \varepsilon_F = p_F^2/2m, \quad p_F = mv_F,$$

зависимостью от четвертой переменной в амплитуде можно пренебречь и для статической амплитуды взаимодействия $\tilde{f}(\mathbf{q}, 0)$ применить фазовую теорию рассеяния

$$\tilde{f} = -\frac{2\pi}{m} g, \quad g(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_l (2l+1) [\sigma^{2l} \delta_l - 1] P_l(\cos \theta), \quad \theta = \widehat{\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}}. \quad (2)$$

Здесь $\delta_l(k)$ — фазы рассеяния электрона вблизи границы Ферми ($k \simeq p_F$) на самосогласованном потенциале PPs . Угол рассеяния мал $\theta \simeq q/p_F \ll 1$, поэтому в качестве g будем использовать амплитуду рассеяния на нулевой угол ($P_l \simeq 1$). Электронейтральность PPs приводит к малости фаз рассеяния ($\delta_l < 1$) [6]. Применяя правило сумм Фриделя $(2/\pi) \sum_l (2l+1) \delta_l(p_F) = 1$, справедливое для самосогласованной плотности зарядов PPs , получим $g \simeq g^0 = \pi/2 p_F$. Точный результат суммирования в (2) отличается множителем $\xi = |g/g^0|^2 \simeq 0.9$ для щелочных металлов. Одночастичные электронные состояния, дающие когерентный вклад в $\delta\rho$, возмущаются несильно, поэтому мнимую часть поляризационного оператора электронов в поле PPs заменим на мнимую часть поляризационного оператора невозмущенного электронного газа при температуре T

$$\begin{aligned} \text{Im } \Pi(\mathbf{q}, \omega, T) &= -2\pi \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} n(\mathbf{k}) (1 - n(\mathbf{k} + \mathbf{q})) \delta\left[\omega + \frac{k^2}{2m} - \frac{(\mathbf{k} + \mathbf{q})^2}{2m}\right] \simeq \\ &\simeq -\frac{m^2 \omega}{2\pi q} \frac{\exp(\omega/T)}{\exp(\omega/T) - 1}, \quad \omega \sim T \ll qv_F \ll \varepsilon_F, \end{aligned} \quad (3)$$

$n(\mathbf{k})$ — импульсное распределение электронов при температуре T . Выражения для вероятности рассеяния $W(\mathbf{p}, \mathbf{p} - \mathbf{q})$ и затухания $\gamma_e(\mathbf{p})$ поступательного движения PPs принимают вид (V — макрообъем)

$$\begin{aligned} W(\mathbf{p}, \mathbf{p} - \mathbf{q}) &= \frac{2\pi}{V} \xi \left[\frac{\pi^2}{m p_F} \right]^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{m^2 \omega}{2\pi q} \frac{\exp(\omega/T)}{\exp(\omega/T) - 1} \delta\left(\omega + \frac{(\mathbf{p} - \mathbf{q})^2}{2m^*} - \frac{p^2}{2m^*}\right), \\ \gamma_e(\mathbf{p}) &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} W(\mathbf{p}, \mathbf{p} - \mathbf{q}). \end{aligned} \quad (4)$$

Выполнив интегрирование в (4), получим точную формулу

$$\begin{aligned} \gamma_e(\varepsilon, T) &= \xi \frac{\pi}{30} \frac{m^*}{m} \frac{1}{\varepsilon_F} \left[\varepsilon^2 + \frac{5\pi^2}{8} T^2 + \frac{15}{4} \varepsilon^2 \int_0^1 dx \frac{x \sqrt{1-x}}{\exp(\varepsilon x/T) - 1} \right], \\ \gamma_e(\varepsilon \gg T) &= \xi \frac{\pi}{30} \frac{m^*}{m} \frac{1}{\varepsilon_F} \left[\varepsilon^2 + \frac{5\pi^2}{4} T^2 \right]. \end{aligned} \quad (5)$$

Заметим, что структура выражения для $\gamma_e(\varepsilon \gg T)$ аналогична структуре выражения для затухания электрона над поверхностью Ферми [7].

Важной характеристикой процесса торможения PPs является его скорость потерь средней энергии $(-d\bar{\varepsilon}/dt)_e$, определяемая через функцию распределения $f(\mathbf{p}, t)$ по импульсу центра инерции

$$\begin{aligned} \left(-\frac{d\bar{\varepsilon}}{dt}\right)_e &= -\int d^3p \frac{p^2}{2m^*} \frac{\partial f(\mathbf{p}, t)}{\partial t}, \\ \frac{\partial f(\mathbf{p}, t)}{\partial t} &= -\sum_{\mathbf{q}} W(\mathbf{p}, \mathbf{p} - \mathbf{q}) f(\mathbf{p}, t) + \sum_{\mathbf{q}} W(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{p}) f(\mathbf{p} + \mathbf{q}, t). \end{aligned} \quad (6)$$

При $T=0$, выполнив интегрирование в (6), получаем аналитическое выражение

$$\left(-\frac{d\bar{\varepsilon}}{dt}\right)_e = \alpha \frac{8}{7} \gamma_e(\bar{\varepsilon}^2, 0) \bar{\varepsilon}, \quad \alpha = \frac{\bar{\varepsilon}^3}{\varepsilon_F^3}. \quad (7)$$

Предполагая функцию распределения узкой [9] $f(\mathbf{p}, t) d^3p = \delta[\varepsilon - \bar{\varepsilon}(t)] d\varepsilon$, что было бы справедливым в случае гидродинамического приближения, находим значение константы $\alpha=1$. На самом деле PPs является квантовой частицей и поэтому $f(\mathbf{p}, t)$ не является узкой. Из конкретного вида кинетического уравнения для $f(\mathbf{p}, t)$ следует, что α является константой ($\alpha=2.7$; см. Приложение).

В случае $T \neq 0$ точного аналитического выражения для $(-d\bar{\varepsilon}/dt)_e$ найти не удастся. Потери энергии сверху можно оценить из решения уравнения (6) в релаксационном приближении

$$\begin{aligned} f(\mathbf{p}, t) &= f^0(\mathbf{p}) + f(\mathbf{p}, 0) \exp(\gamma_e(\mathbf{p}) t), \quad f^0 = \exp(-p^2/2m^*T), \\ \left(-\frac{d\bar{\varepsilon}}{dt}\right)_e &= \frac{8}{7} \gamma_e(\bar{\varepsilon}^2, 0) \frac{1}{\bar{\varepsilon}^2} \left[\bar{\varepsilon}^3 - \frac{105}{8} T^3 \right] \sim \left(\bar{\varepsilon} - \frac{3}{2} T \right), \end{aligned} \quad (8)$$

где $f^0(\mathbf{p})$ — равновесное решение, $f(\mathbf{p}, 0)$ — начальная функция распределения. Мы будем использовать приближенное уравнение, удовлетворяющее предельному случаю при $T=0$ с учетом выхода на равновесие

$$\left(-\frac{d\bar{\varepsilon}}{dt}\right)_e = \alpha \frac{8}{7} \gamma_e(\bar{\varepsilon}^2, 0) \left(\bar{\varepsilon} - \frac{3}{2} T \right). \quad (9)$$

С ростом номера момента ε^k затухание увеличивается. В последнем можно убедиться, написав уравнение для потерь среднего квадрата энергии по аналогии с (7)

$$\left(-\frac{d\bar{\varepsilon}^2}{dt}\right)_e = \nu \frac{32}{21} \gamma_e(\bar{\varepsilon}^2, 0) \left(\bar{\varepsilon}^2 - \frac{15}{4} T^2\right), \quad \nu = \frac{\bar{\varepsilon}^4}{(\bar{\varepsilon}^2)^2} = 2.8, \quad \frac{\gamma_e(\bar{\varepsilon}^2, 0)}{\gamma_e(\bar{\varepsilon}^2)} \simeq 1.5. \quad (10)$$

Зависимости от времени различных моментов ε^k необходимо знать при изучении кинетики конкретных физических процессов, в частности процессов переноса (диффузии) позитрона. Отметим, что полученные выражения этого раздела применимы к более тяжелым квазичастицам (μ -мезон, протон в металлах) при соответствующих значениях ξ .

2. Фононные потери энергии автолокализованного позитрона

Другим механизмом, приводящим к затуханию поступательного движения PPs в области малых энергий ($\varepsilon \ll \varepsilon_F$), является рассеяние на длинноволновых акустических фононах решетки. В простых металлах из-за большой энергии связи PPs ($\omega_0 \simeq -1.5$ эВ) кристаллическая решетка не разрушает PPs , а лишь деформирует его. При вычислении затухания и потерь энергии мы этой деформацией пренебрежем и будем рассматривать PPs сферическим и жестким. Затухание из-за рассеяния на фононах описывается мнимой частью графика

$$\gamma_{ph}(P) = -Im \left\{ \begin{array}{c} \text{PPS} \\ \text{P, } \varepsilon \quad p-q \quad \varepsilon-sq \end{array} \right\} \quad (11)$$

Штрихованная вершина соответствует взаимодействию нейтрального PPs и нейтральной элементарной ячейки кристалла. В пренебрежении вкладом процессов переброса вероятности излучения $W^{em}(\mathbf{p}, \mathbf{p}-\mathbf{q})$, поглощения $W^{ab}(\mathbf{p}, \mathbf{p}+\mathbf{q})$ позитроном фонона и затухание $\gamma_{ph}(\mathbf{p})$ имеют вид

$$\begin{aligned} W^{em}(\mathbf{p}, \mathbf{p}-\mathbf{q}) &= \frac{\pi\Omega_0}{VMs} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} q |U(\mathbf{q})|^2 \frac{\exp(sq/T)}{\exp(sq/T)-1} \delta\left[\frac{p^2}{2m^*} - \frac{(\mathbf{p}-\mathbf{q})^2}{2m^*} - sq\right] \times \\ &\quad \times \eta(\Theta_0 - sq), \\ W^{ab}(\mathbf{p}, \mathbf{p}+\mathbf{q}) &= \frac{\pi\Omega_0}{VMs} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{q |U(\mathbf{q})|^2}{\exp(sq/T)-1} \delta\left[\frac{(\mathbf{p}+\mathbf{q})^2}{2m^*} - \frac{p^2}{2m^*} - sq\right] \eta(\Theta_0 - sq), \\ \gamma_{ph}(\mathbf{p}) &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} [W^{em}(\mathbf{p}, \mathbf{p}-\mathbf{q}) + W^{ab}(\mathbf{p}, \mathbf{p}+\mathbf{q})]. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь Ω_0 — объем элементарной ячейки кристалла, M — масса иона, s — продольная скорость звука, Θ_0 — температура Дебая, η — единичная функция. Взаимодействие $U(\mathbf{q})$ связано с Фурье-компонентой потенциала взаимодействия зарядов PPs и элементарной ячейки ρ_e

$$\begin{aligned} U(\mathbf{q}) &= \frac{1}{\Omega_0} \int d^3R d^3r d^3r' [\rho_+(r) - \delta\rho(r)] \frac{e^2}{|\mathbf{R} + \mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \rho_e(r') e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} = \\ &= 4\pi e^2 [\rho_+ - \delta\rho]_{\mathbf{q}} \rho_e^*(\mathbf{q}) / \Omega_0 q^2. \end{aligned} \quad (13)$$

Значение $[\rho_+ - \delta\rho]_{\mathbf{q}}$ при малых переданных импульсах связано с амплитудой рассеяния на нулевой угол электрона вблизи границы Ферми в самосогласованном потенциале PPs (2)

$$[\rho_+ - \delta\rho]_{\mathbf{q} \ll p_F, \chi} = \xi^{1/2} q^2 / \chi^2, \quad \chi^2 = 4e^2 p_F m / \pi.$$

Используя соотношение $qa \ll 1$, $a^3 = \Omega_0$ и учитывая нейтральность элементарной ячейки $\int d^3r \rho_c = 0$, получим оценку (z — заряд иона)

$$\rho_c(q) \simeq zq^2 r_c^2 / 6, \quad r_c^2 = z^{-1} \int d^3r r^2 \rho_c(r),$$

$$U(q \ll p_F) \simeq \xi^{1/2} \frac{4\pi e^2}{\Omega_0 x^2} z^2 \frac{q^2 r_c^2}{6}, \quad U(q \geq p_F) \simeq \frac{4\pi e^2}{\Omega_0 x^2}. \quad (14)$$

Выполнив интегрирование в (12) с учетом (14) и соотношения $z/\Omega_0 = p_F^3/3\pi^2$, получим следующее выражение для затухания поступательного движения PPs , обусловленного рассеянием на фононах:

$$\gamma_{ph}(\varepsilon, T) = \xi \frac{32\pi}{7 \cdot 27} \frac{z p_F m^{*3}}{m M s} (r_c^2)^2 \varepsilon^3 \left(1 + 14 \int_0^1 \frac{x^6 dx}{\exp(2psx/T) - 1} \right). \quad (15)$$

Потери средней энергии PPs из-за рассеяния на фононах описываются выражением

$$\left(-\frac{d\varepsilon}{dt} \right)_{ph} = \int d^3p f(\mathbf{p}, t) \sum_{\mathbf{q}} [W^{em}(\mathbf{p}, \mathbf{p} - \mathbf{q}) - W^{ab}(\mathbf{p}, \mathbf{p} + \mathbf{q})] s_{\mathbf{q}}. \quad (16)$$

Здесь $f(\mathbf{p}, t)$ — функция распределения PPs по импульсу центра инерции, удовлетворяющая кинетическому уравнению с фононным интегралом столкновений. При $T=0$ интегрирование в (16) дает

$$\left(-\frac{d\varepsilon}{dt} \right)_{ph} = \lambda \frac{7}{4} \gamma_{ph}(\varepsilon, 0) \sqrt{2m^* \varepsilon} s, \quad \lambda = \varepsilon^{7/2} / (\xi)^{7/2}.$$

При конечной температуре T по аналогии с формулой (7) имеем

$$\left(-\frac{d\varepsilon}{dt} \right)_{ph} = \lambda \frac{7}{4} \gamma_{ph}(\varepsilon, 0) \frac{\sqrt{2m^* \varepsilon}}{\varepsilon} s \left(\varepsilon - \frac{3}{2} T \right). \quad (17)$$

В гидродинамическом пределе $\lambda = 1$. Учет кинетического описания приведет к изменению численного значения λ . Из сравнения формул (7) и (17) легко убедиться, что фононный вклад в потери энергии мал по сравнению с электронным $(-d\varepsilon/dt)_{ph} \ll (-d\varepsilon/dt)_e$. Заметим, что в модели делокализованного состояния позитрона в металлах в качестве (e^+ , ph) взаимодействия используют либо деформационный потенциал [2] $U_d \simeq 2/3 \varepsilon_F$, либо экранированное кулоновское взаимодействие позитрона и иона [4] $U = 4\pi z e^2 / \Omega_0 x^2$. В этом случае позитрон-фононное взаимодействие оказывается существенно завышенным по сравнению с взаимодействием нейтрального PPs с фононами, а соотношение электронного и фононного вкладов в потери энергии является обратным $(-d\varepsilon/dt)_{ph} > (-d\varepsilon/dt)_e$ в области малых температур ($T < \Theta_0$) и малых энергий позитрона. Таким образом, электронейтральность автолокализованного позитрона существенно сказывается на интерпретации опытов по термализации позитронов.

3. Термализация PPs . Сравнение с экспериментом

Получим выражения, характеризующие термализацию автолокализованного состояния позитрона, и обсудим существующую интерпретацию опытов по термализации. В пренебрежении фононным вкладом релаксация средней энергии и квадрата средней энергии позитрона описываются уравнениями (7), (8). Решения этих уравнений имеют вид

$$\frac{t}{\tau_1} = \text{Ln} \frac{\varepsilon(\varepsilon_0 - 3/2 T)}{\varepsilon_0(\varepsilon - 3/2 T)} + \frac{3}{2} T \left(\frac{1}{\varepsilon_0} - \frac{1}{\varepsilon} \right), \quad \tau_1^{-1} = \xi \alpha \frac{3\pi}{35} \frac{m^* T^2}{m \varepsilon_F}, \quad (18)$$

$$\frac{t}{\tau_2} = \text{Ln} \frac{\varepsilon^2(\varepsilon_0^2 - 15/4 T^2)}{\varepsilon_0^2(\varepsilon^2 - 15/4 T^2)}, \quad \tau_2^{-1} = \frac{56}{3\pi \alpha} \tau_1^{-1}. \quad (19)$$

Значения $\overline{\varepsilon_0^k} = \overline{\varepsilon^k}(t=0)$ определяются энергией автолокализации позитрона ($\overline{\varepsilon_0} \sim 1$ эВ). Временные параметры τ_k характеризуют времена релаксации моментов $\overline{\varepsilon^k}(t)$. Наибольшее из времен релаксации τ_1 при температурах $T \approx 100$ К сравнивается со временем жизни τ позитрона в металле ($\tau_1 \sim \tau \sim 10^{-10}$ с).

Экспериментальные данные содержат суммарный вклад от аннигиляционных актов за все время, поэтому естественно ввести средние за время жизни позитрона величины моментов функции распределения

$$\langle \varepsilon^k \rangle = \int_0^{\infty} \overline{\varepsilon^k}(t) \exp(-t/\tau) dt/\tau. \quad (20)$$

Результаты численных расчетов для $\langle \varepsilon \rangle$ и $\langle \varepsilon^2 \rangle$ в зависимости от температуры T представлены на рис. 1, 2. Характерные температуры нетермализации T_1, T_2 для величин $\langle \varepsilon \rangle$ и $\langle \varepsilon^2 \rangle$ (когда значения $\langle \varepsilon \rangle$ и $\langle \varepsilon^2 \rangle$ начинают заметно отклоняться от своих равновесных значений) определяются соотношениями

$$T_1 = \frac{2}{3} \langle \varepsilon(T=0) \rangle = [35m\varepsilon_F/6\xi am^*\tau]^{1/2}, \quad (21)$$

$$T_2 = \left[\frac{4}{15} \langle \varepsilon^2(T=0) \rangle \right]^{1/2} \approx \left[\frac{15}{8\pi} \frac{m\varepsilon_F}{\xi m^*\tau} \text{Ln} \frac{32\pi\xi m^* \overline{\varepsilon_0^2} \tau}{225m\varepsilon_F} \right]. \quad (22)$$

С ростом порядка момента $\langle \varepsilon^k \rangle$ температура нетермализации T_k растет ($T_2 \approx 3.0T_1$), причем для $k \geq 2$ значения T_k зависят от начальной кинетической энергии автолокализованного позитрона $\overline{\varepsilon_0}$. Следовательно, для различных (физических и нефизических) величин, описываемых операторами вида $A(\varepsilon) = \sum_k C_k \varepsilon^k$, температуры нетермализации T_A различны и могут заметно превышать значение T_1 . Именно такая ситуация возникает в случае традиционной обработки эксперимента по термализации позитрона в металлах [1].

В опытах по угловым корреляциям аннигиляционных квантов измеряемой величиной является угловая кривая, представляющая собой скорость аннигиляции $N(k_x)$ электрона и позитрона в два фотона с фиксированной проекцией суммарного импульса частиц k_x

$$N(k_x) = \int dk_x dk_y \int_0^{\infty} \Gamma(k, t) \exp(-t/\tau) dt/\tau,$$

$$\Gamma(k, t) = \text{Im} \left\{ \left\langle \begin{array}{c} k-p \\ \bullet \\ \bullet \\ \bullet \\ p \end{array} \right\rangle \right\} \sim \int d^3p f(p, t) n(k-p) \epsilon(k, p) \quad (23)$$

Заштрихованные области соответствуют вершинам притягательного корреляционного взаимодействия позитрона и электронов проводимости ($e^2/v_F \sim 1$), перенормирующего вероятность аннигиляции на фактор усиления ϵ ; $n(\mathbf{k})$ — импульсное распределение электронов. Традиционный метод обработки эксперимента проводится в модели стационарной функции распределения позитрона по импульсу $F(\mathbf{p})$ и заключается в подгонке модельной кривой

$$N_m(k_x, T) \sim \int dk_x dk_y \int d^3p F(\mathbf{p}, T) n(\mathbf{k}-\mathbf{p}) \epsilon(k, \mathbf{p}) \quad (24)$$

к эмпирической кривой $N(k_x, T)$, получаемой вычитанием из экспериментальных данных вклада аннигиляции на связанных электронах [2]. В такой постановке задачи должны выполняться равенства

$$F(\mathbf{p}) = \int_0^{\infty} f(\mathbf{p}, t) \exp(-t/\tau) dt/\tau, \quad \langle \epsilon^k \rangle = \int d^3 p \epsilon^k F(\mathbf{p}). \quad (25)$$

Однако при обработке эксперимента используют распределение бoльцмановского вида $F_0(\mathbf{p}) = \exp(-p^2/2\beta mT)/(2\pi\beta mT)^{3/2}$, где β является подгоночным параметром [1]. Извлекаемая из обработки эксперимента температурная зависимость параметра $\beta(T)$ имеет характерный излом при $T = T_\beta$ [1]. В области $T \leq T_\beta$ произведение βmT выходит на насыщение, а при $T \geq T_\beta$ параметр β оказывается постоянным и равным 1.8—2.3 для щелочных металлов. Естественно определить T_β как температуру нетермализации параметра β . Если бы фактор $3/2\beta T$ совпадал со средней энергией позитрона, то в области малых температур $T < T_\beta$ обработка экспе-

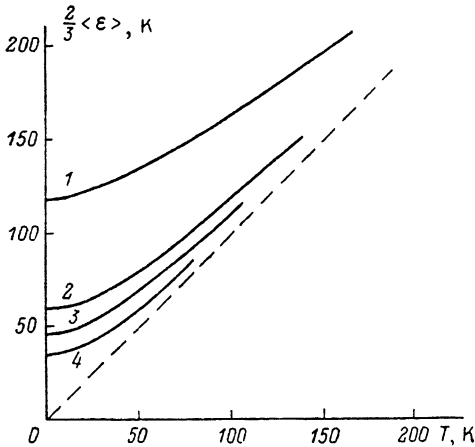


Рис. 1. Зависимость средней энергии позитрона от температуры для щелочных металлов Al (1), Li (2), Na (3), K (4).

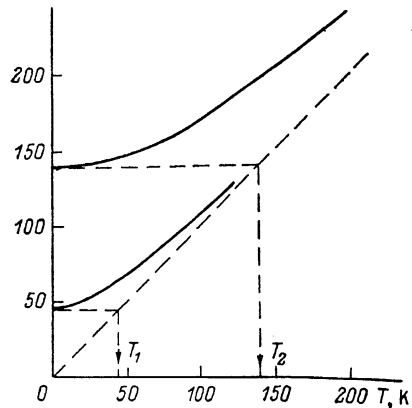


Рис. 2. Зависимость средней энергии и квадрата средней энергии позитрона от температуры для Na.

Верхняя кривая — $(2/3) \langle \epsilon \rangle$, нижняя — $[(4/15) \langle \epsilon^2 \rangle]^{1/2}$. T_1 , T_2 — температуры нетермализации для $\langle \epsilon \rangle$ и $\langle \epsilon^2 \rangle$ соответственно.

римента выдавала бы информацию о величине $\langle \epsilon \rangle$ и соответствующей температуре нетермализации T_1 , а в области $T > T_\beta$ мы получали бы информацию об эффективной массе позитрона ($m^* = \beta m$). Именно это предполагается в традиционном методе обработки угловой кривой с помощью функции $F_0(\mathbf{p})$.

На самом деле параметр $3/2\beta T$ не является средней энергией, так как эффективная функция распределения $F(\mathbf{p})$ не является бoльцмановской ($F \neq F_0$). Поэтому обработка экспериментальной кривой $N(k_z)$ с функцией F_0 не содержит количественной информации о физических величинах (m^* , $\langle \epsilon \rangle$, T_1). Численное сопоставление значения теоретического выражения (21), полученного для доминирующих электронных потерь энергии автолокализованным позитроном PPs , с данными обработки эксперимента дает в пределе $T \rightarrow 0$

$$3/2 \beta T \approx 3.5 \langle \epsilon \rangle \approx 0.8 (\langle \epsilon^2 \rangle)^{1/2}, \quad T_\beta \approx 1.7 T_1.$$

Напомним, что эффективная масса PPs практически совпадает с массой позитрона [9]. В модели делокализованного состояния позитрона, в которой доминирующим механизмом потерь энергии является рассеяние на фононах, расхождение существенней

$$3/2 \beta T \approx 10 \langle \epsilon \rangle, \quad T_\beta \approx 5 T_1.$$

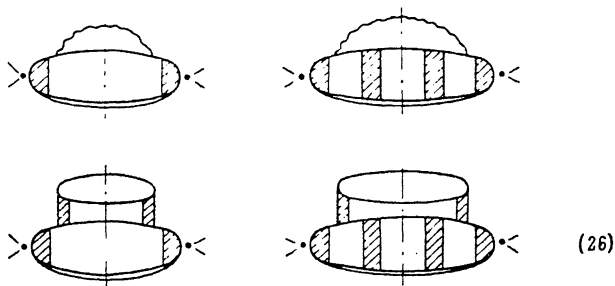
Завышение значения подгоночного параметра $3/2\beta T$ по сравнению с $\langle \epsilon \rangle$ свидетельствует о наличии дальнедействующего хвоста у эффектив-

ной функции распределения $F(\mathbf{p})$. Функция $F(\mathbf{p})$ спадает степенным образом $\sim 1/p^7$, а не экспоненциально, как в случае модельной функции $F_0(\mathbf{p})$ (см. Приложение). Наличие хвоста у $F(\mathbf{p})$ было отмечено в работе [3] при численном исследовании решения кинетического уравнения для электронных потерь энергии делокализованным позитроном. Однако анализа влияния хвоста на результат обработки и интерпретации эксперимента не последовало.

Ситуация осложнилась с появлением работы [4], результатом которой явилось заключение о доминирующем вкладе фононного механизма потерь энергии делокализованного позитрона. При этом дополнительное (по сравнению с температурным) уширение углового распределения аннигиляционных квантов вблизи импульса Ферми автор объяснил наличием хвоста ($\sim 1/p^4$) у равновесной функции позитрона, обусловленного вкладом регулярной (неполюсной) части функции Грина из-за рассеяния на фононах. Учет такого «фононного хвоста» в традиционном методе обработки понизил значение параметра $\beta \simeq 1.4$, что было интерпретировано как подтверждение модели.

На самом деле картина иная. Явление автолокализации позитрона существенно понижает константу позитрон-фононного взаимодействия и делает определяющим механизм электронных потерь энергии PPs . При этом вклад в регулярную часть функции Грина и равновесное импульсное распределение позитрона оказывается малым для объяснения экспериментально наблюдаемого уширения угловой кривой. В нашем подходе происхождение дальнедействующего хвоста универсального вида у эффективной функции распределения $F(\mathbf{p})$ следует как результат усреднения по времени нестационарной функции распределения $f(\mathbf{p}, t)$.

Метод обработки опытов по термализации позитронов должен быть модифицирован с учетом ряда важных моментов. Во-первых, обработку надо вести с нестационарной функцией распределения $f(\mathbf{p}, t)$ или эффективной функцией распределения $F(\mathbf{p})$ (см. Приложение). Во-вторых, необходимо учесть дополнительные вклады в уширение углового распределения аннигиляционных квантов, связанные с диагональными элементами матрицы плотности. Такому вкладу в газовом приближении соответствуют мнимые части графиков типа [9]



Заштрихованные блоки учитывают графики кулоновского взаимодействия во всех порядках. В таких процессах в конечном состоянии помимо двух аннигиляционных квантов находится либо фонон, либо электрон-дырочное возбуждение. Эти процессы не сводятся к представлению парциальной скорости аннигиляции $N(k_z)$ в виде свертки одночастичных электронного и позитронного распределений (20) и не учитываются в решении кинетического уравнения для $f(p, t)$. Такие процессы приводят к вкладу в угловое распределение в области $k_z > p_F$, куда вносят вклад также процессы переброса (рассеяние на статической решетке) и аннигиляция на связанных электронах. Таким образом, в опытах по термализации установлен факт нетермализации позитрона. Количественные следствия традиционной обработки эксперимента пока неоднозначны.

Получим выражения, связывающие моменты $\overline{\varepsilon^k}(t)$ функции распределения $f(\mathbf{p}, t)$, которая удовлетворяет кинетическому уравнению (6). Подстановка выражения (4) для вероятности $W(\mathbf{p}, \mathbf{p}-\mathbf{q})$ в (6) приводит к следующему уравнению ($\varepsilon = p^2/2m^*$):

$$\frac{\partial f(\varepsilon, t)}{\partial t} = \xi \frac{\pi}{4} \frac{m^*}{m\varepsilon_F} \left[- \left(\frac{4}{15} \varepsilon^2 + \frac{\pi^2}{6} T^2 + \int_0^\varepsilon d\omega \omega \frac{\sqrt{1-\omega/\varepsilon}}{\exp(\omega/T)-1} \right) f(\varepsilon, t) + \int_0^\infty d\omega \omega \frac{\exp(\omega/T)}{\exp(\omega/T)-1} f(\varepsilon + \omega, T) + \int_0^\varepsilon d\omega \omega \sqrt{1-\frac{\omega}{\varepsilon}} \frac{f(\varepsilon - \omega, t)}{\exp(\omega/T)-1} \right]. \quad (\text{П. 1})$$

При $T=0$ интегрирование (П. 1) по ε с весом ε^k приводит к следующему уравнению для релаксации момента $\overline{\varepsilon^k}(t)$:

$$- \frac{d\overline{\varepsilon^k}}{dt} = \xi \frac{\pi}{4} \frac{m^*}{m\varepsilon_F} I_k \overline{\varepsilon^{k+2}}, \quad I_k = \frac{4}{15} \left(1 - \frac{15}{(2k+3)(2k+5)} \right). \quad (\text{П. 2})$$

Из (П. 1) видно, что при $T=0$ переменные (ε, t) входят в уравнение только в комбинации $(\varepsilon^2 t / \varepsilon_F)$, поэтому нормированная функция распределения представима в виде

$$f(\varepsilon, t) = \frac{1}{\pi(2m^*)^{3/2}} \left(\frac{t}{\varepsilon_F} \right)^{3/4} \varphi \left(\frac{\varepsilon^2 t}{\varepsilon_F} \right), \quad \int_0^\infty x^{-1/4} \varphi(x) dx = 1, \quad (\text{П. 3})$$

где φ — безразмерная функция. Используя (П. 3), находим

$$\alpha_k = \frac{\overline{\varepsilon^k(t)}}{[\overline{\varepsilon}(t)]^k} = \frac{\int d^3 p \varepsilon^k f(\mathbf{p}, t)}{[\int d^3 p \varepsilon f(\mathbf{p}, t)]^k} = \frac{\int_0^\infty x^{k/2-1/4} \varphi(x) dx}{\left[\int_0^\infty x^{1/4} \varphi(x) dx \right]^k}. \quad (\text{П. 4})$$

Коэффициент α_k не зависит от времени и определяется лишь конкретным видом интеграла столкновений. Дифференцирование (П. 4) по t и подстановка в (П. 2) приводит к рекуррентному соотношению

$$\alpha_{k+2} = \frac{\alpha_3}{7} \left[4k + \frac{15}{k+4} \right] \alpha_k, \quad \alpha_0 = \alpha_1 = 1. \quad (\text{П. 5})$$

В работе [3] численным решением кинетического уравнения для $f(\varepsilon, t)$ при $T=0$ было найдено отношение $\alpha_3 = \overline{\varepsilon^3} / (\overline{\varepsilon})^3 \approx 2.70$. Рекуррентное соотношение (П. 5) позволяет вычислить целочисленные моменты: $\alpha_2 = 15\alpha_3/28$, $\alpha_4 = 2.8\alpha_2^2$, $\alpha_5 = 99\alpha_3^2/49$ В частности, отсюда следует точное соотношение $\overline{\varepsilon^4} / (\overline{\varepsilon^2})^2 = 2.8$, использованное в (10). Значения моментов с произвольным индексом удобно находить с помощью эффективной функции распределения $F(\varepsilon)$ (25).

Интегральное уравнение для $F(\varepsilon)$ имеет вид (П. 1)

$$\left[1 + \frac{4}{15} \frac{\varepsilon^2}{B^2} + \frac{\pi^2}{6} \frac{T^2}{B^2} + \int_0^\varepsilon \frac{d\omega \omega}{B^2} \sqrt{1-\frac{\omega}{\varepsilon}} \frac{1}{\exp(\omega/T)-1} \right] F(\varepsilon) = f(\varepsilon, 0) + \frac{1}{B^2} \left[\int_0^\infty d\omega \omega \frac{\exp(\omega/T)}{\exp(\omega/T)-1} F(\varepsilon + \omega) + \int_0^\varepsilon d\omega \omega \sqrt{1-\frac{\omega}{\varepsilon}} \frac{F(\varepsilon - \omega)}{\exp(\omega/T)-1} \right]. \quad (\text{П. 6})$$

Здесь введено обозначение $B = [4m\varepsilon_F / \xi \pi m^* \tau]^{1/2} \approx (2-5) \cdot 10^{-3}$ эВ. Неоднородный член в (П. 6) представляет собой профиль импульсного распре-

ления в момент $t=0$. Поскольку в этот момент средняя энергия PPs большая ($\varepsilon_0 \gg T$), $f(\varepsilon, 0)$ практически не зависит от температуры. При $T=0$ двойное дифференцирование по ε сводит интегральное уравнение (П. 6) к эквивалентному дифференциальному уравнению

$$F(\varepsilon) = \frac{\partial^2}{\partial \varepsilon^2} \left[-B^2 f(\varepsilon, 0) + \left(B^2 + \frac{4}{15} \varepsilon^2 \right) F(\varepsilon) \right]. \quad (\text{П. 7})$$

Граничными условиями являются конечность $F(0)$ и сходимости нормы $\int d^3 p F(\varepsilon) = 1$. Начальный профиль распределения ($d^2 f / d\varepsilon^2 \sim f / \varepsilon_0^2$) образует эффективное распределение $F(\varepsilon)$ в области энергий $\varepsilon \geq \varepsilon_0$ и совершенно несуществен для $\varepsilon \ll \varepsilon_0$. Из (П.7) следует, что в области $15B^2/4 \ll \varepsilon \ll \varepsilon_0^2$ функция распределения $F(\varepsilon)$ спадает степенным образом $\sim 1/p^7$. При конечной температуре T на основе (П.6) можно убедиться, что степенной хвост существует в области $T \lesssim \varepsilon \ll \varepsilon_F$.

Список литературы

- [1] Kim S. M., Stewart A. T. // Phys. Rev. 1975. V. B11. N 7. P. 2490—2499.
- [2] Hyodo T., McMullen T., Stewart A. T. // Phys. Rev. 1986. V. B33. N 5. P. 3050—3057.
- [3] Woll E. J., Carbotte J. P. // Phys. Rev. 1967. V. 164. № 3. P. 985—993.
- [4] Mikeska H.-J. // Phys. Lett. 1967. V. 24A. N 8. P. 402—404; Z. Phys. 1970. V. 232. P. 159—173.
- [5] Perkins A., Carbotte J. P. // Phys. Rev. 1970. V. B1. N 1. P. 101—108.
- [6] Гольтяев О. М., Осадчиев В. М., Поздняков С. Г. // Письма в ЖЭТФ. 1983. Т. 37. № 2. С. 79—82; ФТТ. 1987. Т. 29. N 3. С. 649—658.
- [7] Мигдал А. Б. Теория конечных Ферми-систем и свойства атомных ядер. М., 1983.
- [8] Osadchiev V. M., Pozdnyakov S. G. // Proc. VIII Int. Conf. Positron Annihilation. 1988. P. 377—379.
- [9] Meshakin V. I., Osadchiev V. M., Shiskin A. V. // Ibid. P. 380—382.

Московский инженерно-физический институт

Поступило в Редакцию
12 февраля 1990 г.