

01;02;05

## Рассеяние позитронов на фононах в металле

© Д.А. Грязных

Российский федеральный ядерный центр,  
Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. академика Е.И. Забабахина,  
456770 Снежинск, Челябинская область, Россия  
E-mail: d.a.gryaznykh@vniitf.ru

(Поступило в Редакцию 23 марта 1999 г. В окончательной редакции 26 октября 1999 г.)

Рассматриваются процессы, определяющие взаимодействие позитронов с веществом. Для рассеяния на фононах, доминирующего при энергиях порядка 1 eV, получены формулы для тормозной способности, длины свободного пробега. Для вольфрама подсчитаны тормозная способность, длина свободного пробега и полная длина пробега для энергий позитрона 0.025–10 eV.

### Введение

Источники позитронов низких энергий находят широкое применение в атомной физике, физике твердого тела, физике и химии поверхностей и тонких пленок, материаловедении, изучении дефектов и т. д. Один из возможных способов получения интенсивных пучков низкоэнергетических позитронов заключается в использовании ускорителей заряженных частиц, что реализовано в комплексе *SPring-8* [1]. Сверхпроводящие магнитные вилглеры, установленные в электронно-позитронном накопительном кольце, создают мощное синхротронное излучение с энергией фотонов, существенно превосходящей порог образования пар. Образующиеся позитроны собираются и проходят через замедлитель, уменьшая энергию до тепловой. Точный учет процессов замедления позитронов позволяет правильно оценить его эффективность и выход медленных позитронов.

Процессы ионизации хорошо изучены теоретически и экспериментально [2]. Процессы же с участием атомов решетки (коллективные возбуждения, взаимодействия с дырками и фононами) достаточно сложны и недостаточно изучены экспериментально. В данной работе с использованием существующих теоретических моделей позитрон-фононного взаимодействия и экспериментальных данных по энергии позитрона в металле проведены вычисления параметров рассеяния позитрона на фононах в вольфраме.

### Кинетическое уравнение для позитронов

Во взаимодействии с веществом на разных этапах доминируют различные процессы: при высоких энергиях — ионизация [2], выше порога образования плазмонов могут образовываться коллективные возбуждения [3], при более низких энергиях — образование электрон-дырочных пар, при энергиях порядка eV доминирует рассеяние на фононах.

Кинетическое уравнение для функции распределения позитронов  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ , где  $\mathbf{p}$  — волновой вектор позитрона, имеет вид

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{p})\nabla_{\mathbf{r}} + \mathbf{F}\nabla_{\mathbf{p}} \right) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \left[ \frac{\partial}{\partial t} \right]_s - (\lambda_b + \varkappa)f + f_i(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (1)$$

Здесь  $\lambda_b$  — скорость аннигиляции позитронов в делокализованном состоянии;  $\varkappa$  — скорость захвата позитронов в дефектах;  $f_i$  — источник;  $[\ ]_s$  — скорость рассеяния, определяемая как

$$\left[ \frac{\partial}{\partial t} \right]_s = \int d\mathbf{q} [R(\mathbf{q}, \mathbf{p})f(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t) - R(\mathbf{p}, \mathbf{q})f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)], \quad (2)$$

где  $R$  — амплитуда рассеяния.

Интенсивность рассеяния на электронах проводимости при низких энергиях можно вычислить, используя позитрон-электронное взаимодействие в приближении *random-pulse approximation* (RPA) [4],

$$R_{el}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{\pi\hbar} \left( \frac{e^2 a_0}{4\pi k_F} \right)^2 \int d\mathbf{k} \delta \left[ \frac{\hbar^2(\mathbf{k} + \mathbf{p} - \mathbf{q})^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 \mathbf{q}^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e} - \frac{\hbar^2 \mathbf{p}^2}{2m^*} \right] \times \left[ 1 - f_F^0 \left( \frac{\hbar^2(\mathbf{k} + \mathbf{p} - \mathbf{q})^2}{2m_e}, T \right) \right] f_F^0 \left( \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e}, T \right), \quad (3)$$

где  $a_0$  — боровский радиус,  $k_F$  — волновой вектор Ферми,  $m^*$  — эффективная масса позитрона,  $f_F^0(E, T) = \{\exp[(E - E_F)/k_B T] + 1\}^{-1}$ ; приближение допустимо для энергий ниже энергии ионизации, порядка 10 eV.

Подробный обзор вопросов теории взаимодействия позитронов с веществом и приложений к исследованиям свойств материалов приведен в работе [5].



Рис. 1. Фейнмановские диаграммы для процессов излучения и поглощения фононов.

### Позитрон-фононное взаимодействие

Продольные акустические фононы доминируют в рассеянии при тепловых энергиях. В дебаевском приближении с энергетической зависимостью  $E(k) = \hbar sk$  выражение для амплитуды рассеяния имеет вид [2]

$$R_{ph}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{\gamma^2}{4\pi^2} |\mathbf{q} - \mathbf{p}| \left\{ [f_B^0(\hbar s|\mathbf{q} - \mathbf{p}|, T) + 1] \delta \left( \frac{\hbar^2 \mathbf{p}^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 \mathbf{q}^2}{2m^*} - \hbar s|\mathbf{q} - \mathbf{p}| \right) + f_B^0(\hbar s|\mathbf{q} - \mathbf{p}|, T) \delta \left( \frac{\hbar^2 \mathbf{q}^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 \mathbf{p}^2}{2m^*} - \hbar s|\mathbf{q} - \mathbf{p}| \right) \right\} \theta(\omega_D - s|\mathbf{q} - \mathbf{p}|), \quad (4)$$

где  $s$  — скорость звука,  $\omega_D = s(6\pi n)^{1/3}$  — дебаевская частота, функция распределения Бозе-Эйнштейна  $f_B^0(E, T) = [\exp(E/k_B T) - 1]^{-1}$ ; первое слагаемое в (4) отвечает излучению фонона, второе — поглощению.

Соответствующие диаграммы приведены на рис. 1.

Константа взаимодействия позитронов с фононами в приближении деформационного потенциала определяется как

$$\gamma = \frac{E_d}{(2\rho s)^{1/2}}, \quad (5)$$

где  $\rho$  — плотность,  $E_d$  — деформационный потенциал равный

$$E_d = V \frac{\partial E_+}{\partial V}, \quad (6)$$

$E_+$  — полная энергия кристалла с позитроном на низшем энергетическом уровне ( $\mathbf{k} = 0$ ). Экспериментальные [6] и теоретические [7] значения для некоторых веществ приведены в таблице.

Потенциал деформации  $E_d$ , определенный в (6), для некоторых материалов и время жизни позитрона

Материал	$E_d^{\text{exp}}$ , eV	$E_d^{\text{th}}$ , eV	$E_{\perp}$ , eV	$\tau$ , ps
Al	-6.7	-7.70	-4.41	166
Cu	-9.4	-9.45	-4.81	106
Ag	-11	-9.48	-5.36	120
Mo	-16	-14.3	-1.92	111
W			-1.31	100
Au			-4.59	10

Для вольфрама  $E_+ = -1.31$  eV; поскольку он принадлежит к той же группе, что и молибден, то  $E_d \approx -11$  eV.

### Пробеги позитронов

В уравнении (4)  $R$  зависит только от абсолютных значений  $p = |\mathbf{p}|$ ,  $q = |\mathbf{q}|$  и  $\Delta = |\mathbf{p} - \mathbf{q}|$ . Тогда интеграл (2) записывается в виде

$$\left[ \frac{\partial f(p)}{\partial t} \right]_s = \frac{2\pi}{p} \int q dq \Delta d\Delta [R(q, p, \Delta) \times f(q) - R(p, q, \Delta) f(p)]. \quad (7)$$

Проинтегрировав по  $\Delta$ , получим

$$\left[ \frac{\partial f(p)}{\partial t} \right]_s = \int dq [R_1(q, p) f(q) - R_1(p, q) f(p)], \quad (8)$$

где  $R_1(p, q) dq dt$  — вероятность перевода позитрона из состояния с волновым числом  $p$  в состояние с волновым числом в области около  $q$  размера  $dq$  за время  $dt$ .

Используя выражение (4), получим, сняв дельта-функции,

$$R_1 = \frac{\gamma^2 q}{2\pi p \hbar s} \cdot \begin{cases} f_B^0(\hbar s \Delta_0) + 1, & q_{\min} < q < p, \\ f_B^0(\hbar s \Delta_0), & p < q < q_{\max}, \end{cases} \quad (9)$$

где

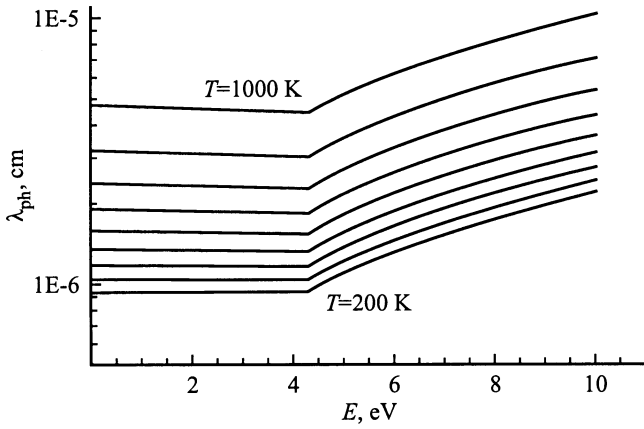
$$\Delta_0 = \frac{\hbar}{2ms} |p^2 - q^2|. \quad (10)$$

Подставив (10) в (9), получим

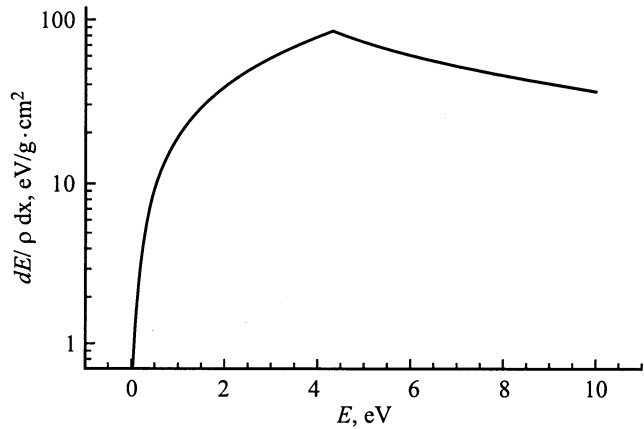
$$R_1 = \frac{\gamma^2 q}{2\pi p} \frac{\hbar}{4m^2 s^3} (q^2 - p^2)^2 \times \begin{cases} f_B^0 \left( \frac{\hbar^2}{2m} (p^2 - q^2) \right) + 1 & q_{\min} < q < p, \\ f_B^0 \left( \frac{\hbar^2}{2m} (q^2 - p^2) \right), & p < q < q_{\max}. \end{cases} \quad (11)$$

Перейдем к распределениям по энергетической переменной  $y_p = \hbar^2 p^2 / 2mk_B T$

$$R_y(y_p, y_q) = \frac{\gamma^2 m (k_B T)^3}{2\pi \hbar^5 s^3 p} (y_p - y_q)^2 \times \begin{cases} f_B^0(y_p - y_q) + 1, & y_{\min} < y_q < y_p, \\ f_B^0(y_q - y_p), & y_p < y_q < y_{\max}. \end{cases} \quad (12)$$



**Рис. 2.** Длина свободного пробега позитронов в вольфраме с учетом рассеяния на фононах при  $T = 200\text{--}1000$  К.



**Рис. 3.** Тормозная способность вольфрама с учетом рассеяния позитронов на фононах при  $T = 300$  К.

Значения  $y_{\min}$  и  $y_{\max}$  определяются из требований

$$|p - q| \leq \Delta \leq p + q, \quad s\Delta < \omega_D \quad (13)$$

и равны

$$y_{\min} = \max \left( y_p + \frac{2ms^2}{k_B T} - s\sqrt{\frac{2my_p}{k_B T}}, y_p - y_D \right),$$

$$y_{\max} = \min \left( y_p + \frac{2ms^2}{k_B T} + s\sqrt{\frac{2my_p}{k_B T}}, y_p + y_D \right), \quad (14)$$

где  $y_D = (\hbar\omega_D)/(k_B T)$ .

Рассмотрим область энергий, где отсутствует рассеяние позитрона назад, т.е.  $x_{\min(\max)} = y_p \pm y_D$ , что выполняется при

$$y_p > \frac{k_B T}{2m} \left( \frac{y_D}{s} + \frac{2ms}{k_B T} \right)^2.$$

Среднее время между взаимодействиями

$$\frac{1}{\tau_{ph}} = \int R_y(y_p, y_q) dy_q = \frac{\gamma^2 m (k_B T)^3}{2\pi \hbar^5 s^3} \frac{1}{p} \mathcal{A}, \quad (15)$$

где

$$\mathcal{A} = 2 \int_0^{y_D} x^2 f_B^0(x) dx + \frac{y_D^3}{3}. \quad (16)$$

Соответственно длина свободного пробега

$$\lambda_{ph} = \tau_{ph} \frac{\hbar p}{m} = \frac{4\pi \hbar^4 s^3}{\gamma^2 m (k_B T)^3} \frac{E}{\mathcal{A}}, \quad (17)$$

где  $E$  — кинетическая энергия позитрона.

Потеря энергии описывается уравнением

$$\frac{dy_p}{dt} = \int (y_q - y_p) R_y(y_p, y_q) dy_q$$

$$= -\frac{\gamma^2 m (k_B T)^3 y_D^4}{8\pi \hbar^5 s^3} \frac{1}{p}. \quad (18)$$

Тормозная способность равна

$$-\frac{dE}{dx} = -(k_B T) \frac{m}{\hbar p} \frac{dy_p}{dt} = \frac{\gamma^2 m (\hbar\omega_D)^4}{16\pi \hbar^4 s^3} E^{-1}. \quad (19)$$

Подсчитаем пробеги фононов в вольфраме. Для вольфрама (в системе единиц  $c = 1$ )  $|E_d| = 11$  eV,  $\omega_D = 3.534 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$ ,  $\rho = 19.3 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3} = 2.917 \cdot 10^{65} \text{ eV} \cdot \text{s}^{-3}$ ,  $s = 1.112 \cdot 10^{-5} = 3.33 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$ ,  $\gamma^2 = 1.865 \cdot 10^{-59} \text{ eV} \cdot \text{s}^3$ .

Примем  $T = 293$  К. Тогда  $k_B T = 0.0252$  eV,  $y_D = 0.9230$ ,  $\mathcal{A} = 0.8819$ .

Рассматриваемая область есть  $E > 4.58$  eV. Расчеты дают ( $[E_p] = \text{eV}$ )

$$\tau_{ph} = 1.219 \cdot 10^{-14} \sqrt{E_p} \text{ s},$$

$$\lambda_{ph} = 7.228 \cdot 10^{-7} E_p \text{ cm},$$

$$-\frac{dE}{\rho dx} = 372 E^{-1} \text{ eV cm}^2 \cdot \text{g}^{-1}. \quad (20)$$

Во всей области для вычисления среднего времени между взаимодействиями и потерь энергии следует воспользоваться формулами

$$\frac{1}{\tau_{ph}} = \frac{\gamma^2 m (k_B T)^3}{2\pi \hbar^5 s^3} \frac{1}{p} \left\{ \mathcal{F}_2(y_p - y_{\min}) \right.$$

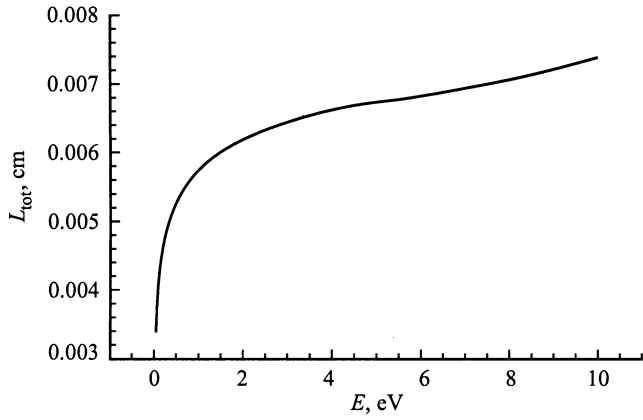
$$\left. + \mathcal{F}_2(y_{\max} - y_p) + \frac{1}{3} (y_p - y_{\min})^3 \right\},$$

$$\frac{dy_p}{dt} = \frac{\gamma^2 m (k_B T)^3}{2\pi \hbar^5 s^3} \frac{1}{p} \left\{ -\mathcal{F}_3(y_p - y_{\min}) \right.$$

$$\left. + \mathcal{F}_3(y_{\max} - y_p) - \frac{1}{4} (y_p - y_{\min})^4 \right\}, \quad (21)$$

где

$$\mathcal{F}_n(x) = \int_0^x \frac{y^n dy}{\exp(y) - 1}.$$



**Рис. 4.** Длина полного пробега позитронов в вольфраме с учетом рассеяния на фононах при  $T = 300$  К.

В приближении  $E \gg ms^2$

$$\lambda_{ph} = \frac{4\pi \hbar^4 s^4}{\gamma^2 m} \frac{E}{2T^3 \mathcal{F}_2\left(\frac{E-E_{\min}}{T}\right) + \frac{1}{3}(E-E_{\min})^3}, \quad (22)$$

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{\gamma^2 m}{16\pi \hbar^4 s^3} \frac{(E-E_{\min})^4}{E}, \quad (23)$$

$$L_{tot} = \int_0^E \frac{dx}{dE} dE = \frac{\pi \hbar^4}{\gamma^2 m^3 s} \times \begin{cases} \ln \frac{E}{2ms^2}, & E < \tilde{E}, \\ \ln \frac{\tilde{E}}{2ms^2} + \frac{m^2 s^4}{\hbar^4 \omega_D^4 (E^2 - \tilde{E}^4)}, & E > \tilde{E}, \end{cases} \quad (24)$$

где

$$E_{\min} = \max(E - s\sqrt{2mE}, E - \hbar\omega_D), \quad \tilde{E} = \frac{\hbar^2 \omega_D^2}{2ms^2}. \quad (25)$$

Зависимость  $dE/dx$  и полной длины пробега  $L_{tot}$  от температуры содержится только в скорости звука и дебаевской частоте. В рассматриваемом диапазоне температур и используемом приближении мы можем ею пренебречь.

Длина свободного пробега позитронов в вольфраме и тормозная способность вольфрама были рассчитаны для энергий позитронов в диапазоне 0.025–10 eV при температурах  $T = 200$ –1000 К. График длины свободного пробега позитронов в вольфраме приведен на рис. 2, тормозной способности — на рис. 3, длины полного пробега — на рис. 4.

## Заключение

Рассеяние позитронов на акустических фононах доминирует при тепловых энергиях. Дебаевское приближение позволяет оценить вклад фононов в рассеяние

позитронов. В настоящей работе проведены вычисления длины свободного пробега позитронов в вольфраме и тормозной способности вольфрама для энергий позитронов в диапазоне 0.025–10 eV при температурах  $T = 200$ –1000 К.

Работа выполнена при поддержке МНТЦ (проект № 767).

## Список литературы

- [1] *Ando F.* // J. Synchrotron Rad. 1996. Vol. S3. P. 201–215.
- [2] *Perkins A., Carbotte J.R.* // Phys. Rev. B. 1970. Vol. 1. P. 101–107. *Frensky W.R.* // Rev. Mod. Phys. 1990. Vol. 62. P. 745–791.
- [3] *Oliva J.* // Phys. Rev. B. 1980. Vol. 21. P. 4909–4917.
- [4] *Woll E.R., Carbotte J.P.* // Phys. Rev. 1967. Vol. 164. P. 985–993.
- [5] *Puska M.J., Nieminen R.M.* // Rev. Mod. Phys. 1994. Vol. 66. P. 841–897.
- [6] *Soinen E., Huono H., Huttunen P.A.* et al. // Phys. Rev. B. 1990. Vol. 41. P. 6227–6233.
- [7] *Boev O.V., Puska M.J., Nieminen R.M.* // Phys. Rev. B. 1987. Vol. 36. P. 7786–7794.