

## ЛОКАЛИЗОВАННЫЙ И ДЕЛОКАЛИЗОВАННЫЙ ПОЗИТРОНИЙ В ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ В МОДЕЛИ САМОЗАХВАТА

© И.В.Бондарев

Научно-исследовательский институт ядерных проблем  
при Белорусском государственном университете,  
220050 Минск, Белоруссия  
(Поступила в Редакцию 18 января 1996 г.)

Теоретически исследована возможность самолокализации (самозахвата) атома позитрония, обусловленная его взаимодействием с акустическими фононами в ионных кристаллах. Рассчитаны характеристики локализованных и делокализованных состояний позитрония в кристаллах NaF, NaCl, KCl, KI и  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с известными экспериментальными данными. Впервые теоретически объяснено отсутствие эффекта самозахвата позитрония в кристалле  $\alpha$ -кварца.

Образование связанного состояния электрона и позитрона — атома позитрония (Ps) — во многих кристаллических диэлектриках является в настоящее время хорошо установленным экспериментальным фактом [1–3]. Установлено, в частности, что почти во всех (за исключением LiF) хорошо очищенных щелочно-галогидных кристаллах (ШГК), а также в кристаллическом  $\alpha$ -кварце ( $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>) при пониженных температурах (обычно это температуры порядка нескольких десятков К) атом Ps делокализован и находится в состоянии с волновой функцией блоховского типа [4–8]. Образование блоховского позитрония в этих кристаллах подтверждается наблюдением узких пиков (центральный пик и боковые сателлиты, разнесенные на расстояние, обратно пропорциональное периоду решетки) в импульсном распределении фотонов  $2\gamma$ -распада при облучении кристаллов низкоэнергетичными позитронами. Такая форма импульсного распределения может быть лишь в том случае, если волновая функция аннигилирующего позитрония является функцией Блоха [2]. Атом позитрония в этом случае делокализован в объеме всего кристалла.

С повышением температуры в импульсном распределении распадных фотонов для всех ШГК отмечается исчезновение боковых и резкое уширение центрального пика, свидетельствующее о локализации Ps [9–12]. Волновая функция такого локализованного позитрония является гауссовой, а измеренный экспериментально характерный размер области локализации имеет порядок постоянной решетки кристалла.

Поскольку локализация наблюдается при достаточно низких температурах ( $T < 150$  K), объяснить ее захватом позитрония термически созданными в образце дефектами не представляется возможным (см., однако, [8]). Подтверждением этому служит также и факт отсутствия эффекта локализации в  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>, где Ps остается делокализованным вплоть до температуры 684 K [13]. Наблюдаемая с ростом температуры локализация хорошо объясняется самозахватом позитрония, а именно температурно-активированным переходом делокализованного позитрония в метастабильное локализованное состояние, возникающее вследствие его взаимодействия с короткодействующим потенциалом решеточной вибрации (акустические фононы) [3,10–12]. Аналогичный механизм хорошо известен для экситонов, электронов и дырок в кристаллических диэлектриках [14]. Так, например, в ШГК основное состояние электронов делокализовано, основные же состояния экситонов и дырок локализованы. Это связывается с малой ( $\sim m_0$  — масса свободного электрона) зонной массой (широкая зона) электронов и большими ( $\sim (5-10)m_0$ ) зонными массами (узкие зоны) экситонов и дырок в этих кристаллах. Причем для экситонов возможен температурно-активированный переход из основного локализованного в метастабильное делокализованное состояние, означающий, что эти состояния лишь незначительно отличаются по энергии. Для позитрония в ШГК имеет место аналогичная ситуация с той лишь разницей, что вследствие его сравнительно небольшой зонной массы ( $\sim (2.5-4)m_0$ ) основным становится делокализованное, а метастабильным — локализованное состояние.

В настоящее время накоплен значительный экспериментальный материал по самозахвату Ps в ШГК, в то время как практически отсутствуют теоретические работы, анализирующие это явление. Численный расчет энергий и ангиляционных характеристик локализованных и делокализованных позитрониевых состояний в ШГК выполнен в недавно вышедшей работе [15]. Однако теоретический анализ, объясняющий саму возможность температурно-активированного перехода позитрония из делокализованного в метастабильное локализованное состояние, по-прежнему отсутствует. Наобъясненным до сих пор остается и факт отсутствия эффекта локализации Ps в  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>.

В данной работе развита теория самозахвата делокализованного позитрония в ионных кристаллах и  $\alpha$ -кварце. В разделе 1 исследуется функциональная зависимость энергии позитрония от его константы связи с продольной ветвью акустических колебаний в ионном кристалле при  $T = 0$  K. Вследствие электронейтральности атома Ps взаимодействие его с оптическими колебаниями слабо [14,16], что оправдывает указанное выше приближение. Кроме того, как показано в [17,18], именно короткодействующее взаимодействие частицы с акустическими фононами ответственно за самозахват. В разделе 2 выводятся основные характеристики делокализованных и локализованных позитрониевых состояний: эффективная масса, среднее число виртуальных фононов, радиус локализации. В разделе 3 приводятся и обсуждаются результаты численных расчетов характеристик позитрония в ШГК, полученные на основе теории, изложенной в предыдущих двух разделах.

# 1. Энергия позитрония как функция его константы связи с продольными акустическими фононами в ионном кристалле

При выводе зависимости энергии позитрония от акустической константы связи мы в основном будем следовать работе Тоязавы [17], где впервые был детально исследован случай самозахвата электрона. Рассмотрим  $P_s$  в кристалле в приближении сильной связи. В этом случае гамильтониан позитрония в решетке в представлении вторичного квантования при учете взаимодействия с ближайшими атомами имеет вид

$$H = H_{Ps} + H_{ph} + H_{int}, \quad (1)$$

где

$$H_{Ps} = -W \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}}^{\sim} a_{\mathbf{n}+\mathbf{m}}^+ a_{\mathbf{n}} \quad (2)$$

оператор энергии атома  $P_s$  в решетке в приближении ближайших соседей,  $a_{\mathbf{n}}^+$  и  $a_{\mathbf{n}}$  — операторы рождения и уничтожения позитрония в  $\mathbf{n}$ -м узле решетки (знак тильды указывает на то, что суммирование по  $\mathbf{m}$  осуществляется по узлам решетки, соседним с  $\mathbf{n}$ ),  $W = \hbar^2/2M^*a^2$ ,  $M^*$  — зонная масса позитрония,  $a$  — расстояние между ближайшими соседними атомами в кристалле,

$$H_{ph} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar u q b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} \quad (3)$$

энергия продольных акустических колебаний решетки,  $b_{\mathbf{q}}^+$ ,  $b_{\mathbf{q}}$  — операторы рождения и уничтожения продольных акустических фононов,  $u$  и  $q$  — скорость и волновой вектор продольной звуковой волны соответственно,

$$H_{int} = \frac{2}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{q}} F_a(\mathbf{q}) \cos\left(\frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}{2}\right) (b_{\mathbf{q}} - b_{\mathbf{q}}^+) a_{\mathbf{n}}^+ a_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}} \quad (4)$$

оператор энергии взаимодействия позитрония с продольной ветвью акустических колебаний в кристалле [19], где  $\mathbf{r}$  — относительная координата электрона и позитрона в атоме  $P_s$ ,

$$F_a(\mathbf{q}) = -iE_d \sqrt{\frac{\hbar q}{2Mu}} = -F_a^*(\mathbf{q}), \quad (5)$$

$N$  — число элементарных ячеек в кристалле,  $M^*$  — суммарная масса атомов элементарной ячейки,  $E_d$  — параметр деформационного потенциала (он предполагается одинаковым для электрона и позитрона вследствие того, что нижние электронная и позитронная зоны проводимости в ШГК слабо отличаются друг от друга [20]).

Исследуем вариационным методом нижайшее состояние оператора полной энергии позитрония (1), соответствующее определенному значению его волнового вектора  $\mathbf{k}$ . Для этого используем пробную волновую функцию основного состояния позитрония в виде

$$|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}} S_{\mathbf{k}}(\mathbf{n}) a_{\mathbf{n}}^+ |0\rangle |1S_{1/2}\rangle, \quad (6)$$

где  $|0\rangle$  — вакуумное состояние по координате центра масс позитрония и фононам,  $|1S_{1/2}\rangle$  — основное внутреннее состояние Ps,

$$S_{\mathbf{k}}(\mathbf{n}) = \exp\left\{\sum_{\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{q}, \mathbf{n}) b_{\mathbf{q}} - \text{h.c.}\right\} \quad (7)$$

оператор, характеризующий деформацию решетки вокруг узла  $\mathbf{n}$ , т. е. смещение равновесных положений, вокруг которых происходят колебания нормальных координат [17],

$$\beta_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}, \mathbf{n}) = f_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{n}}, \quad S_{\mathbf{k}}^{-1}(\mathbf{n}) = S_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{n}). \quad (8)$$

Функция  $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{q})$  подлежит определению из условия минимума функционала полной энергии позитрония

$$J(f_{\mathbf{k}}(\mathbf{q})) = \langle \Psi_{\mathbf{k}} | H | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle. \quad (9)$$

Выполняя стандартную процедуру минимизации функционала (9), получаем для полной энергии атома Ps в кристалле

$$E(\mathbf{k}) = -W \sum_{\mathbf{m}} (1 + \zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{m})) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{m} - \zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{m})} - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{|V_a(\mathbf{q})|^2}{W \sum_{\mathbf{m}} (1 - e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{m}}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{m} - \zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{m})} + \hbar u q}, \quad (10)$$

где

$$V_a(\mathbf{q}) = 2F_a(\mathbf{q}) \langle 1S_{1/2} | \cos\left(\frac{\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}{2}\right) | 1S_{1/2} \rangle = \frac{2F_a(\mathbf{q})}{\left(1 + \left(\frac{q a_B}{4}\right)^2\right)^2} \quad (11)$$

формфактор позитрония как составной частицы, обусловленный относительным движением электрона и позитрона в составе атома Ps (вследствие малости характерных энергий акустических фононов ( $\sim 0.01$  eV) по сравнению с разностью энергий основного и первого возбужденного внутренних состояний позитрония ( $\sim 5$  eV) мы предполагаем, что внутренние состояния при рассеянии на виртуальных акустических фононах не возбуждаются и Ps все время остается в основном  $1S_{1/2}$ -состоянии),  $a_B$  — боровский радиус позитрония, а функция  $\zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{m})$  определяется соотношением

$$\zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{m}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{|V_a(\mathbf{q})|^2 (1 - e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{m}})}{\left(W \sum_{\mathbf{m}} (1 - e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{m}}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{m} - \zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{m})} + \hbar u q\right)^2}. \quad (12)$$

Функция  $\zeta_{\mathbf{k}}$  определяет среднее число виртуальных фононов, окружающих Ps в состоянии с волновой функцией (6). В этом легко убедиться, если усреднить оператор полного числа фононов  $\sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}}$  по состоянию (6) (см. раздел 2). Таким образом, большим значениям  $\zeta_{\mathbf{k}}$  соответствует большое число виртуальных фононов, что отвечает сильной связи позитрония с фононами, и наоборот. При фиксированном  $\mathbf{k}$  в простом кубическом кристалле все  $\zeta_{\mathbf{k}}(\mathbf{m})$  одинаковы, и (12) сводится к одному трансцендентному уравнению. Рассмотрим это уравнение для  $\mathbf{k} = 0$ . Введем обозначение  $\zeta_0(\mathbf{m}) = \zeta$ . Переходя далее от суммирования по  $\mathbf{q}$  к интегрированию и вводя безразмерные переменные, имеем

$$\zeta = 12g\gamma e^{2\zeta} \int_0^1 d\xi \frac{\xi^3}{(1 + \alpha^2 \xi^2)^4 (\xi + \gamma e^{\zeta})^2}, \quad (13)$$

где

$$g = \frac{E_d^2}{12WMu^2}, \quad \gamma = \frac{\hbar u q_D}{\hbar^2 q_D^2 / 2M^*} \quad (14)$$

соответственно безразмерная константа связи позитрония с акустическими фононами и параметр неадиабатичности (отношение максимальной энергии фононов к энергии атома Ps с тем же волновым вектором), впервые введенный в [7] для электронов,  $q_D$  — дебаевский волновой вектор фононов,

$$\alpha = \frac{q_D a_B}{4} \quad (15)$$

безразмерный параметр, характеризующий внутреннее движение частиц в составе позитрония.

Соответствующее (13) значение полной энергии позитрония (10) после аналогичных преобразований принимает вид

$$-\frac{E(0)}{6W} = (1 + \zeta)e^{-\zeta} + 12g\gamma e^{\zeta} \int_0^1 d\xi \frac{\xi^2}{(1 + \alpha^2 \xi^2)^4 (\xi + \gamma e^{\zeta})}. \quad (16)$$

Система уравнений (13), (16) полностью определяет энергию как функцию безразмерной константы связи  $g$  позитрония с продольными акустическими фононами, а также параметров  $\gamma$  и  $\alpha$ : решение уравнения (13) определяет  $\zeta$  как функцию параметров  $g$ ,  $\gamma$  и  $\alpha$ , решение же (16) с учетом полученной функциональной зависимости  $\zeta(g, \gamma, \alpha)$  дает энергию Ps как функцию тех же параметров. С другой стороны, систему из уравнений (13) и (16) (после исключения  $g$  из (16) с помощью (13)) можно рассматривать как параметрическое задание энергии Ps как функции  $g$ ,  $\gamma$  и  $\alpha$  (в этом случае  $\zeta$  является параметром). Причем, как уже указывалось выше, большим значениям параметра  $\zeta$  соответствует сильная связь позитрония с фононами, и наоборот.

Рассмотрим поведение полной энергии Ps в предельных случаях слабой и сильной связи с фононами. Тогда, рассматривая уравнения

(13), (16) как параметрическое определение энергии позитрония в кристалле, имеем

$$g \approx \frac{\zeta e^{-2\zeta}}{6\gamma} (1 + 2\alpha^2), \quad \zeta \ll 1, \\ -\frac{E(0)}{6W} \approx (1 + 2\zeta)e^{-\zeta} \quad (17)$$

и

$$g \approx \frac{\gamma}{3} \zeta \left(1 + \frac{8}{3} \alpha^2\right), \quad \zeta \gg 1, \\ -\frac{E(0)}{6W} \approx \frac{4}{3} \gamma \zeta \left(1 + \frac{4}{15} \alpha^2\right). \quad (18)$$

В уравнениях (17), (18) учтено, что параметры  $\gamma$  и  $\alpha^2$  в типичных ионных кристаллах имеют порядок величины  $\sim 0.01$  и, следовательно, могут рассматриваться как параметры малости, по которым можно разлагать зависящие от них функции. Поэтому (17), (18) выписаны с точностью до линейных по  $\gamma$  и  $\alpha^2$  членов. Исключая далее из этих уравнений параметр  $\zeta$ , получим соответственно приближения слабой и сильной связи с фононами для энергии позитрония

$$-\frac{E(0)}{6W} \approx 1 + 6\gamma g, \quad \zeta \ll 1, \\ -\frac{E(0)}{6W} \approx 4g \left(1 - \frac{12}{5} \alpha^2\right), \quad \zeta \gg 1. \quad (19)$$

## 2. Основные характеристики локализованных и делокализованных позитрониевых состояний

1) Э ф ф е к т и в н а я м а с с а. В случае слабой связи с фононами перенормированная виртуальным фононным полем эффективная масса позитрония может быть получена из анализа массового оператора  $P_s$  с использованием техники перенормировок, развитой в [21]. Массовый оператор  $P_s$  во втором порядке теории возмущений по взаимодействию с виртуальными фононами при  $T = 0$  К имеет вид [19,22]

$$\sum(p, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{|V_a(\mathbf{q})|^2}{\omega - E(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \hbar u q + i\delta}, \quad (20)$$

где  $E(\mathbf{k} + \mathbf{q}) = \hbar^2(\mathbf{k} + \mathbf{q})^2/2M^*$  и  $p = \hbar k$  — энергия и импульс «голого» позитрония соответственно. Константы перенормировки массы получаются разложением вещественной части массового оператора (20) с точностью до линейных по  $\omega$  и  $p^2/2M^*$  членов [21]

$$\text{Re} \sum(p, \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{|V_a(\mathbf{q})|^2}{\omega - E(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \hbar u q} \approx \Delta_0 + \alpha_1 \omega + \alpha_2 \frac{p^2}{2M^*}. \quad (21)$$

При этом перенормированная полем виртуальных фононов эффективная масса атома Ps определяется соотношениями

$$M^{**} = \left( \frac{1}{p} \frac{d\omega}{dp} \right)^{-1} = M^* \frac{1 - \alpha_1}{1 + \alpha_2}. \quad (22)$$

Расчет перенормировочных констант  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  по формуле (21) приводит к следующим результатам:

$$\alpha_1 = -8 \left( \frac{6}{\pi} \right)^{4/3} g\gamma \int_0^1 \frac{d\xi \xi}{(1 + \alpha^2 \xi^2)^4 (\xi + \gamma)^2} \approx -\frac{4M^{*2} E_d^2}{\pi^2 \hbar^3 \rho u} \left( \ln \left( \frac{k_B T_D}{2M^* u^2} \right) - 1 \right),$$

$$\alpha_2 = -\frac{8}{3} \left( \frac{6}{\pi} \right)^{4/3} g\gamma \int_0^1 \frac{d\xi \xi (\xi - 3\gamma)}{(1 + \alpha^2 \xi^2)^4 (\xi + \gamma)^3} \approx -\frac{4M^{*2} E_d^2}{3\pi^2 \hbar^3 \rho u} \left( \ln \left( \frac{k_B T_D}{2M^* u^2} \right) - 3 \right), \quad (23)$$

где  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $T_D$  — дебаевская температура,  $\rho$  — плотность кристалла. Согласно (23), константы перенормировки массы позитрония в случае слабой связи с фононами имеют порядок параметра неадиабатичности  $\gamma \sim 0.01$ . В этом случае из (22) следует, что эффективная масса позитрония лишь незначительно превышает его зонную массу.

Соотношения (22), (23) получены с использованием теории возмущений в приближении слабой связи с фононами, что соответствует малым значениям параметра  $\zeta_{\mathbf{k}}$ , введенного в разделе 1. При больших  $\zeta_{\mathbf{k}}$  (сильная связь) эффективная масса Ps может быть получена непосредственно из уравнения (10) [17]. В этом случае из (12) следует, что  $\zeta_{\mathbf{k}}$  слабо зависит от  $\mathbf{k}$ . Тогда уравнение (10) приводится к виду

$$E(\mathbf{k}) - E(0) = -W\zeta e^{-\zeta} \sum_{\mathbf{m}} (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{m}} - 1) \approx \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2M^{**}},$$

откуда получаем

$$M^{**} = \zeta^{-1} e^{\zeta} M^*. \quad (24)$$

Учитывая, что при сильной связи должно выполняться условие  $g \sim 1$ , из первого уравнения (18) находим, что  $\zeta \sim 3/\gamma$ . Тогда из (24) следует, что отношение эффективной и зонной масс позитрония при сильной связи с фононами составляет  $\sim e^{10} - e^{100}$ . В этом случае атом Ps должен быть практически неподвижен («самолокализован»).

2) Среднее число виртуальных фононов. Среднее число виртуальных фононов, окружающих позитроний в состоянии (6), определяется усреднением оператора полного числа фононов по этому состоянию

$$\langle n \rangle = \langle \Psi_{\mathbf{k}} | \sum_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle, \quad (25)$$

откуда, переходя к интегрированию, с учетом (6) для  $k \approx 0$  получаем (ср. с (13))

$$\langle n \rangle = 12\lambda g \gamma e^{2\zeta} \int_0^1 d\xi \frac{\xi}{(1 + \alpha^2 \xi^2)^4 (\xi + \gamma e^\zeta)^2}, \quad (26)$$

где  $\lambda = 6/q_D^2 a^2$  (в ионных кристаллах  $\lambda \sim 1$ ), а константа связи  $g$ , как и в случае с энергией, удовлетворяет уравнению (13). Переписывая систему из уравнений (13), (26) в параметрическом виде, где  $\zeta$  — параметр, и разлагая ее при малых и больших  $\zeta$  (с учетом малости  $\gamma$  и  $\alpha^2$ ), получаем после исключения параметра для слабой связи

$$\langle n \rangle \approx 12\lambda g \gamma \left( \ln \left( 1 + \frac{1}{\gamma} \right) - 1 \right) = \frac{4M^{*2} E_d^2}{\pi^2 \hbar^3 \rho u} \left( \ln \left( 1 + \frac{k_B T_D}{2M^* u^2} \right) - 1 \right), \quad \zeta \ll 1, \quad (27a)$$

а для сильной связи

$$\langle n \rangle \approx \frac{6\lambda g}{\gamma} = \frac{E_d^2 k_B^2 T_D^2}{2\pi^2 \rho \hbar^3 u^5}, \quad \zeta \gg 1. \quad (27b)$$

Уравнения (27) дают приближения слабой и сильной связи для среднего числа виртуальных фононов, окружающих позитроний в кристалле при абсолютном нуле температуры. В случаях слабой и сильной связи параметр неадиабатичности  $\gamma$  стоит в числителе и в знаменателе соответственно. Поэтому  $\langle n \rangle$  мало при слабой и велико при сильной связи позитрония с фононами.

3) Р а д и у с л о к а л и з а ц и и. Для оценки радиуса локализации атома Ps в кристалле определим корреляционную функцию

$$F(\mathbf{m}) = \left\langle \sum_{\mathbf{n}} a_{\mathbf{n}+\mathbf{m}}^+ a_{\mathbf{n}} \right\rangle = \langle \Psi_{\mathbf{k}} | \sum_{\mathbf{n}} a_{\mathbf{n}+\mathbf{m}}^+ a_{\mathbf{n}} | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle. \quad (28)$$

Здесь  $\mathbf{m}$  — вектор, выходящий из  $\mathbf{n}$ -го узла решетки по направлению к другим узлам (необязательно ближайшим, в отличие от (2)). Функция (28) по своему смыслу определяет среднее число одновременно скоррелированных из-за присутствия позитрония узлов решетки. Для малых  $k \sim 0$  в простом кубическом кристалле (28) с учетом (6) сводится к виду

$$F(\mathbf{m}) \approx e^{-\zeta(m)}, \quad (29)$$

где функция  $\zeta(m)$  задается уравнением (12), взятым при  $k = 0$ ,  $m = an$ ,  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Вводя далее непрерывную координату  $R = 2m$ , можно определить эффективный радиус локализации позитрония в кристалле по характерному затуханию коррелятора (29) с ростом  $R$ . Вычисление корреляционной функции (29) приводит к следующему ре-



ультрату:

$$F(R) = \exp \begin{cases} -\langle n \rangle + \frac{24\lambda g\gamma}{q_D R} \int_0^1 d\xi \frac{\sin\left(\frac{q_D R}{2}\xi\right)}{(\xi + \gamma)^2} & \text{— слабая связь } (\zeta \ll 1), \\ -\langle n \rangle \left(1 - \left(\frac{4}{q_D R}\right)^2 \sin^2\left(\frac{q_D R}{4}\right)\right) & \text{— сильная связь } (\zeta \gg 1), \end{cases} \quad (30)$$

где среднее число виртуальных фононов  $\langle n \rangle$  для случаев слабой и сильной связи задается формулами (27). Как видно из (30), при больших  $R$  в обоих случаях коррелятор определяется средним числом фононов, которое в силу (27) мало для слабой и велико для сильной связи  $P_s$  с фононами. Поэтому при слабой связи коррелятор (30) с ростом  $R$  практически не затухает, при сильной же, напротив, затухает очень быстро. Соответственно при слабой связи в силу незатухания корреляционной функции радиус локализации атома  $P_s$  в кристалле  $R_0$  является бесконечно большим:  $R_0 \sim \infty$  (позитроний делокализован). При сильной связи радиус локализации конечен и может быть оценен из условия

$$F(R_0) = \frac{1}{\langle n \rangle e}, \quad (31)$$

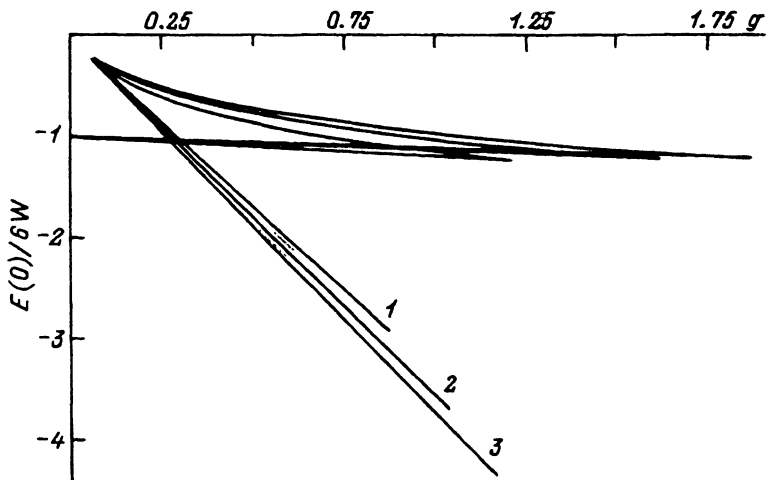
которое сводится к следующему трансцендентному уравнению для  $R_0$ :

$$\sin\left(\frac{q_D R_0}{4}\right) = \sqrt{1 - \frac{1 + \ln\langle n \rangle}{\langle n \rangle} \frac{q_D R_0}{4}}. \quad (32)$$

Поскольку  $\langle n \rangle$  при сильной связи велико, из (32) имеем  $q_D R_0/4 \sim \pi/4$ , откуда с учетом  $q_D \sim \pi/2a$  получаем  $R_0 \sim 2a$ : радиус локализации сильно связанного позитрония имеет порядок постоянной решетки кристалла, позитроний локализован.

### 3. Результаты численных расчетов и обсуждение

На рисунке представлены графики зависимостей энергии позитрония от акустической константы связи  $g$  для трех типов ШГК: NaF, NaCl и KCl. Графики получены численным табулированием формулы (16) с учетом (13). В расчетах использовались численные значения констант ионных кристаллов, взятые из [23,24], и численные значения зонных масс позитрония, рассчитанные в [25]. Две пересекающиеся прямые для каждого типа ШГК соответствуют случаям: пологая — приближению слабой связи, описываемому уравнениями (17) и первым уравнением (19), крутая — приближению сильной связи, описываемому уравнениями (18) и вторым уравнением (19). Для  $g \lesssim 0.3$  в реальных экспериментальных условиях ( $T \gtrsim 0$  К) возможно одновременное существование двух позитрониевых состояний, одно из которых (слабо связанное) стабильно, а другое (сильно связанное) метастабильно. Причем в соответствии с формулами для радиуса локализации (30)–(32), среднего числа фононов (27) и эффективной массы (22)–(24) слабо связанное



Зависимость полной энергии позитрония от безразмерной константы связи с акустическими фононами для кристаллов NaF (1), NaCl (2) и KCl (3).

стабильное состояние должно быть делокализованным, метастабильное же сильно связанное состояние, напротив, (само)локализовано в области порядка постоянной решетки кристалла. Величина энергетического скачка  $\mathcal{E}$  между энергиями обоих состояний определяется разностью второго и первого уравнений (19)

$$\mathcal{E} \approx 6W \left( 1 - 4g \left( 1 - \frac{3}{2} \gamma - \frac{12}{5} \alpha^2 \right) \right). \quad (33)$$

Описанная ситуация, как уже указывалось выше, имеет место и на эксперименте. Поэтому, подставляя экспериментально измеренные величины  $\mathcal{E}$  в формулу (33), можно при заранее известных зонных массах позитрония определить константы деформационного потенциала  $E_d$  для соответствующих ионных кристаллов. Отметим, что выражение (33) существенно отличается от аналогичного выражения, вытекающего из теории самозахвата электрона [17]: для позитрония появляется дополнительный вклад, обусловленный наличием дополнительного параметра малости  $\alpha^2$ , связанного с внутренним движением частиц в составе атома Ps. Причем в соответствии с (15)  $\alpha^2$  зависит от типа кристалла, так что для всех ШГК имеет место соотношение  $\alpha^2 \sim \gamma \sim 0.01$ . Наличие дополнительного параметра малости, зависящего от типа кристалла, приводит также к разному для различных типов ШГК наклону прямых сильной связи на рисунке, что отсутствует для электрона (прямая сильной связи для электрона не зависит от типа кристалла [17]).

Легко может быть получено выражение для температуры самозахвата позитрония, определяющейся как температура, при которой по крайней мере половина всех атомов Ps находится в самозахваченном состоянии [11]. Следуя [11], имеем для фракции самозахваченного по-

$$f_{st} = \frac{1}{1 + AT^{3/2} \exp(\mathcal{E}/k_B T)},$$

где  $A = (3u^3/4\pi T_D^3)(\pi M^{**}/2k_B)^{3/2} \sim 10^{-6} \text{ K}^{-3/2}$ , откуда с учетом условия  $f_{st} = 1/2$  получаем следующее трансцендентное уравнение для температуры самозахвата атома Ps в кристалле

$$\exp\left(\frac{\mathcal{E}}{k_B T_{st}}\right) = \frac{1}{AT_{st}^{3/2}}. \quad (34)$$

Разности энергий  $\mathcal{E}$  были экспериментально измерены в NaF [9,10], KCl [11] и KI [12]. Подставляя экспериментально измеренные значения  $\mathcal{E}$  для NaF и KCl в (33), мы рассчитали значения констант деформационного потенциала  $E_d$  в этих кристаллах. В расчетах использовались значения зонных масс позитрония в NaF и KCl, вычисленные в [25], и численные значения констант ионных кристаллов, взятые из [23,24]. Затем с полученными значениями  $E_d$  по формулам (22), (23); (27), (32) и (34) были рассчитаны соответственно эффективная масса делокализованного Ps, средние числа окружающих оба типа позитрония виртуальных фононов, радиус локализации самозахваченного позитрония и температура самозахвата. Для кристалла KI известны экспериментальные значения величины энергетического скачка  $\mathcal{E}$  и эффективной массы  $M^{**}$  [12], но зонная масса Ps  $M^*$  никем не вычислялась. Поэтому для KI мы вначале по формулам (22), (23) по известной эффективной массе вычисляли зонную, а затем, подставляя значения  $\mathcal{E}$  и  $M^*$  в формулу (33), рассчитывали константу деформационного потенциала  $E_d$ , после чего с полученным значением  $E_d$  рассчитывались характеристики позитрония в KI. Для кристалла NaCl, наоборот, отсутствуют экспериментальные данные по величине энергетического скачка, но вычислена зонная масса позитрония [25]. Поэтому при расчетах характеристик позитрония в NaCl использовалось значение  $E_d = 6.2 \text{ eV}$ , оцененное по формуле (33) из условия  $\mathcal{E} \approx 0.08 \text{ eV}$ . Результаты всех перечисленных расчетов, а также использовавшиеся в расчетах экспериментальные данные, приведены в таблице.

Для кристалла  $\alpha\text{-SiO}_2$ , как уже указывалось выше, явления самозахвата не наблюдалось вплоть до температуры  $684 \text{ K}$  [13]. По формуле (33) мы рассчитали значения величины энергетического скачка  $\mathcal{E}$  и температуры самозахвата для позитрония в  $\alpha\text{-SiO}_2$ . Было получено значение  $\mathcal{E} = 1.17 \text{ eV}$ , что соответствует температуре самозахвата  $T_{st} = 3255 \text{ K}$ . В расчетах использовалось значение  $E_d = 3.38 \text{ eV}$ , оцененное в [26] по температурной зависимости эффективной массы позитрония в  $\alpha$ -кварце. Зонная масса Ps вычислялась по формулам (22), (23), в которые подставлялось экспериментально измеренное в [13] значение эффективной массы. Экспериментальные данные, использовавшиеся в расчетах, и результаты расчетов приведены в таблице. Полученные данные объясняют наблюдающееся экспериментально отсутствие эффекта самозахвата позитрония в кристаллическом  $\alpha$ -кварце.

Характеристики делокализованных и локализованных позитрониевых состояний в ионных кристаллах

Кристалл	$\mathcal{E}_{\text{exp}}$ , eV	$M_{\text{exp}}^*/2m_0$	$M^*/2m_0$	$M^{**}/2m_0$	$R_0^{\text{exp}}$ , Å	$R_0$ , Å	$T_{\text{st}}^{\text{exp}}$ , К	$T_{\text{st}}$ , К	$\langle n \rangle$ (слабая связь)	$\langle n \rangle$ (сильная связь)	$g$	$E_d$ , eV
NaF	0.10(7) [10]	$1.50 \pm 0.20$ [9]	$1.014$ [25]	1.42	$3.2$ [10]	1.55	$\sim 150$ [10]	139	0.35	112	0.30	8.51
NaCl	—	$1.37 \pm 0.20$ [12]	$1.119$ [25]	1.56	—	2.01	$\sim 100$ [12]	104	0.35	99	0.28	6.2
KCl	0.04(7) [11]	$1.56 \pm 0.15$ [11]	$1.233$ [25]	1.78	$3.5$ [11]	2.95	$\sim 65$ [11]	66	0.41	74	0.27	6.03
KI	0.03(1) [12]	$1.98 \pm 0.10$ [12]	1.39	—	$4.3$ [12]	3.52	$\sim 50$ [12]	44	0.38	78	0.26	5.28
$\alpha$ -SiO <sub>2</sub>	—	$1.62 \pm 0.15$ [13]	1.43	—	—	—	—	3255	0.12	—	0.09	$3.38$ [26]

Как видно из таблицы, рассчитанные значения характеристик  $P_s$  в ШГК хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными. Исключение, быть может, составляет радиус локализации сильно связанного позитрония  $R_0$ : рассчитанные значения несколько занижены по сравнению с экспериментальными. Причиной этого, по-видимому, является упрощенный вид пробной волновой функции (6): она не учитывает распределения атомов  $P_s$  в окрестности узлов решетки [17]. Поэтому вычисляемые на основе этой функции значения  $R_0$  получаются всегда несколько заниженными по сравнению с экспериментально измеренными величинами.

Автор признателен В.Н. Кушниру за полезные обсуждения и ценные замечания.

Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда фундаментальных исследований Министерства образования и науки РБ.

### Список литературы

- [1] Арефьев Л.П., Воробьев С.А., Прокопьев Е.П. Позитроника в радиационном материаловедении ионных структур и полупроводников. М. (1983). 87 с.
- [2] Dupasquier A. In: Positron Solid State Physics / Ed. W. Brandt and A. Dupasquier. North-Holland. Amsterdam (1983). P. 510.
- [3] Hyodo T. In: Positron Annihilation / Ed. P.C. Jain, R.M. Singru and K.P. Gopinathan. World Scientific. Singapore (1985). P. 643.
- [4] Hyodo T., Takakusa Y. J. Phys. Soc. Jap. **42**, 3, 1065 (1977).
- [5] Hyodo T., Takakusa Y. J. Phys. Soc. Jap. **45**, 2, 795 (1978).
- [6] Kasai J., Fujiwara K. J. Phys. Soc. Jap. **51**, 9, 3077 (1982).
- [7] Арефьев К.Р., Кузнецов П.В., Боев О.В. ФТТ **23**, 6, 1877 (1981).
- [8] Арефьев К.Р., Боев О.В., Воробьев С.А., Кузнецов П.В. ФТТ **26**, 6, 1678 (1984).
- [9] Hyodo T., Takakusa Y. J. Phys. Soc. Jap. **49**, 6, 2243 (1980).
- [10] Hyodo T., Kasai J., Takakusa Y. J. Phys. Soc. Jap. **49**, 6, 2248 (1980).
- [11] Kasai J., Hyodo T., Fujiwara K. J. Phys. Soc. Jap. **52**, 10, 3671 (1983).
- [12] Kasai J., Hyodo T., Fujiwara K. J. Phys. Soc. Jap. **57**, 1, 329 (1988).
- [13] Ikari H., Fujiwara K. J. Phys. Soc. Jap. **46**, 1, 92 (1979).
- [14] Ueta M., Kanzaki H., Kobayashi K., Toyozawa Y. Excitonic Processes in Solids. Springer. Berlin (1986).
- [15] Zhang C.G., Song K.S. J. Phys.: Cond. Matter **6**, 5, 9173 (1994).
- [16] Боев О.В., Арефьев К.Р. Изв. вузов. Физика **2**, 3, 118 (1982).
- [17] Toyozawa Y. Progr. Theor. Phys. **26**, 1, 29 (1961).
- [18] Sumi A., Toyozawa Y. J. Phys. Soc. Jap. **35**, 1, 137 (1973).
- [19] Давыдов А.С. Теория твердого тела. М. (1976). 639 с.
- [20] Kunz A.B., Waber J. Solid State Commun. **39**, 2, 831 (1981).
- [21] Mikeska H.-J. Z. Phys. **232**, 1, 159 (1970).
- [22] Mahan G.D. In: Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductors / Ed. J.T. Devreese. North-Holland. Amsterdam (1972). P. 553.
- [23] Ботаки А.А., Воробьев А.А., Ульянов В.Л. Радиационная физика ионных кристаллов. М. (1980). 167 с.
- [24] Акустические кристаллы / Под ред. М.П. Шаскольской. М. (1982). 632 с.
- [25] Boev O.V., Arefiev K.P. Phys. Stat. Sol. (b) **125**, 1, 619 (1984).
- [26] Boev O.V., Arefiev K.P. In: Positron Annihilation / Ed. P.C. Jain, R.M. Singru and K.P. Gopinathan. World Scientific. Singapore (1985). P. 782.