

01;11

О работе выхода позитрона из металла с диэлектрическим покрытием

© В.В. Погосов, А.В. Бабич, П.В. Вакула, А.Г. Кравцова

Запорожский национальный технический университет,
69063 Запорожье, Украина
e-mail: vpogosov@zntu.edu.ua

(Поступило в Редакцию 1 марта 2011 г.)

Показано, что наличие диэлектрического покрытия на металлической поверхности может привести к изменению знака работы выхода позитрона. Расчеты выполнены по методу Кона–Шема для поликристаллов и граней Al, Cu и Zn.

Одним из весьма чувствительных методов диагностики объема и поверхности массивных тел, ультрадисперсных сред и наноструктур является метод аннигиляции позитронов (см. работы [1–3] и ссылки в них).

После формирования низкоэнергетического пучка позитроны инжектируются в среду. Из анализа аннигиляционных спектров следует, что даже при гелиевых температурах позитроны в металлах термализованы. Скорость аннигиляции позитрона в среде зависит от концентрации электронов окружения. Основными характеристиками позитрона являются его работа выхода W_p (или энергия связи) и время жизни в среде.

Работа выхода электронов W_e из металла всегда положительна (металл для электронов является потенциальной ямой). Для одних металлов работа выхода позитронов положительна, а для ряда других отрицательна [1–2]. Этому соответствует наблюдаемая на опыте интенсивная обратная эмиссия инжектированных позитронов. К числу металлов с отрицательными значениями W_p относятся, например, Al, Cu, Fe, Mo, Ni, Cr и Ti. Для них в [4,5] из анализа энергетического спектра обратной эмиссии (по отношению к вакуумному уровню) были получены значения $W_p < 0$ (эти металлы являются потенциальным барьером для инжектируемых позитронов).

Одним из каналов фиксации обратной эмиссии позитронов служит регистрация „эмиссии“ атомов позитрония. Атомы Ps образуются на хвосте пространственного распределения электронов за поверхностью металла. Работа выхода W_{Ps} может быть рассчитана из цикла Борна. Для того чтобы „извлечь“ из металла атом позитрония, нужно извлечь электрон и позитрон по отдельности, а затем „объединить“ их в атом

$$W_{Ps} = W_e + W_p - \frac{Ry}{2}, \quad (1)$$

$Ry = 13.6 \text{ eV}$.

Работы выхода электрона и позитрона определяются своими объемными составляющими и поверхностным

дипольным барьером D :

$$W_e = W_e^{\text{bulk}} + eD, \quad (2)$$

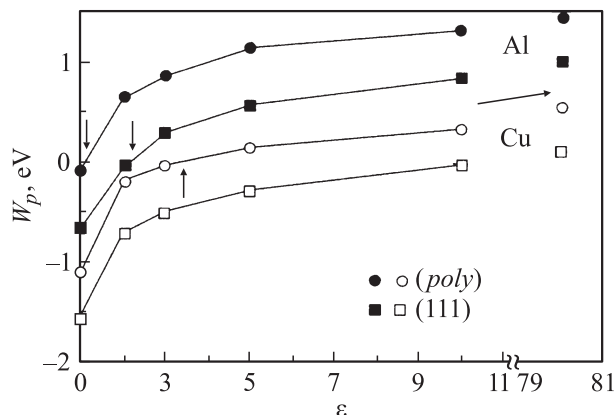
$$W_p = W_p^{\text{bulk}} - eD, \quad (3)$$

где e — элементарный положительный заряд, $W_p^{\text{bulk}} = -E_{\text{corr}}^{p-e} - E_0$. Вклады E_{corr}^{p-e} и E_0 относятся к позитрон-электронным корреляциям в однородном электронном газе и позитрон-ионному взаимодействию в элементарной ячейке. Для Al, Cu и Zn величины $W_p^{\text{bulk}} = 3.97, 2.82$ и 3.80 eV рассчитаны ранее (см. работу [6] и ссылки в ней).

Полагая, что электростатический потенциал вдали за поверхностью равен нулю, величина электростатического барьера $D = -\bar{\phi}$, где $\bar{\phi} < 0$ значение электростатического потенциала в объеме металла [7]. Вследствие того что $D > 0$, конкуренция слагаемых в (3) приводит к величинам W_p разного знака. Величина дипольного барьера на поверхности металла зависит от кристаллографических индексов грани и весьма чувствительна к способу вычисления.

В работе [7] предложен метод, позволяющий вычислять характеристики металлической поверхности, покрытой изолятором. Расчеты проведены по методу Кона–Шема в рамках модели стабильного желе. Вследствие того, что зависимость $D(\epsilon)$ оказалась сильной (ϵ — диэлектрическая постоянная покрытия), можно утверждать, что для одного и того же металла (или индексов грани) знак работы выхода позитрона может меняться с изменением ϵ . Работа выхода позитрония в соответствии с (1)–(3) целиком определяется объемными свойствами металла и вообще не зависит от величины поверхностного барьера $D(\epsilon)$.

Результаты вычислений для Al и Cu, демонстрирующие эффект изменения знака работы выхода позитронов, приведены на рисунке. Для поликристаллического Zn / грани Zn (0001) зависимость $D(\epsilon)$ не приводит к принципиальным изменениям: $W_p = +0.61 / -2.59$ и $+2.01 / -1.23 \text{ eV}$ соответственно при $\epsilon = 1$ и 80 . Аналогичные выводы можно сделать для граней Al(110)/(100) [$W_p = -4.86 / -2.23; -3.39 / -0.55 \text{ eV}$]



и Cu(110)/(100) [$W_p = -4.52 / -2.64$; $-3.02 / -0.95$ eV] соответственно при $\epsilon = 1$; 80.

Заметим, что в антивеществе (антиметалле) анти-электроны проводимости, согласно принципу Паули, имели бы те же самые многочастичные эффекты, что и электроны проводимости обычного металла. Как следствие, работа выхода позитронов, например из антимида, равнялась бы работе выхода электронов из меди.

Полученные результаты могут быть использованы для диагностики поверхности изделий, наноматериалов и, возможно, в нанотехнологиях.

Список литературы

- [1] Schultz P.J., Lynn K.G. // Rev. Mod. Phys. 1988. Vol. 60. P. 3.
- [2] Погосов В.В., Якубов И.Т. // ФТТ. 1994. Т. 36. С. 2343.
- [3] Графутин В.И., Илюхина О.В., Мяснищева Г.Г., Прокопьев Е.П., Тимошенко С.П., Фунтиков Ю.В., Чаплыгин Ю.А. // Наноструктуры. Математическая физика и моделирование. 2010. Т. 2. С. 15.
- [4] Jibaly M., Weiss A., Koymen A.R., Mehl D., Stiborek L., Lei C. // Phys. Rev. B. 1991. Vol. 44. P. 12 166.
- [5] Jibaly M., Koymen A.R., Chun L., Mehl D., Weiss A. // Positron Annihilation (Material Science Forum). 1992. Vol. 105–110. P. 1399.
- [6] Nieminen R.M., Oliva J. // Phys. Rev. B. 1980. Vol. 22. P. 2226.
- [7] Погосов В.В., Бабич А.В. // ЖТФ. 2008. Т. 78. С. 116.