

©1995

ЭФФЕКТИВНАЯ МАССА СВЯЗАННОЙ ПАРЫ ЭЛЕКТРОН-ПОЗИТРОН В ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ

Р.Х.Сабиров

Московский педагогический государственный университет,
119882, Москва, Россия
(Поступила в Редакцию 19 января 1995 г.)

Исследован вопрос о возможных пределах изменения эффективной массы позитрония в ионных кристаллах с решеткой типа NaCl. Показано, что использование в расчете модели потенциала точечных ионов приводит к такому значению верхней границы эффективной массы позитрония, которое существенно меньше экспериментально определенных величин эффективной массы позитрония в ионных кристаллах. Указаны некоторые возможные причины данного расхождения. Рассмотрен вопрос о корректной оценке эффективной массы снизу.

1. Эксперимент ^[1-4] указывает на возможность образования связанного состояния электрона и позитрона в ионных кристаллах. Однако эксперимент не может дать однозначного ответа относительно механизма образования связанного состояния. В ^[5] предложена дублонная модель связанного состояния, суть которой состоит в локализации позитрона и электрона соответственно около аниона и катиона кристалла и их объединении за счет кулоновского взаимодействия в единую позитрон-электронную пару. В силу периодичности кристалла такая связанная система типа «розетки» в кристалл кубической симметрии будет мигрировать по кристаллу. Оценка эффективной массы дублона в щелочно-галогидных кристаллах проведена в ^[6].

Дублонная модель не единственно возможная модель связанного состояния электрона и позитрона в ионных кристаллах. Возможна иная картина, когда ионы кристалла, наоборот, как бы выталкивают электрон и позитрон в междоузельное пространство, где за счет кулоновского взаимодействия образуется их связанное состояние. Такое связанное состояние будем называть позитронием, хотя следует помнить, что его свойства могут существенно отличаться от свойств свободного позитрония. Так, здесь принципиально нельзя отделить относительное движение частиц от движения их центра масс, что связано с неоднородностью пространства в кристалле.

В ^[7] на основе расчета поправки второго порядка к энергии позитрония в рамках теории возмущений по кристаллическому потенциалу проведена оценка эффективной массы позитрония в щелочно-галогидных кристаллах. Однако в расчете использован ряд приближений, область применимости которых заранее неясна. В частности,

стался открытым вопросом о том, можно ли при вычислении поправки второго порядка к энергии пренебречь вкладом от состояний непрерывного энергетического спектра электрон-позитронной системы. В связи с этим данный подход требует более детального анализа. Отметим, что это относится и к хорошо известной статье Нимтева и Веррала [8] по расчету данной поправки применительно к кристаллу LiH.

2. Гамильтониан взаимодействующих электрона и позитрона в поле кристаллического потенциала можно записать в координатах центра масс частиц R и их относительного движения r в виде

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{4m_0} \Delta_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{m_0} \Delta_{\mathbf{r}} - \frac{e^2}{r} + eV \left(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2} \right) - eV \left(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2} \right), \quad (1)$$

где m_0 , e — масса и заряд электрона, Δ — лапласиан, $V(\mathbf{r})$ — кристаллический потенциал, \hbar — постоянная Планка. Будем рассматривать кристаллический потенциал (два последних слагаемых в (1)) как возмущение. Тогда состояния невозмущенного гамильтониана описываются волновыми функциями

$$\Psi_{\mathbf{k},N} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \Phi_N(\mathbf{r}), \quad (2)$$

где \mathbf{k} — квазиимпульс центра масс частиц, $\Phi_N(\mathbf{r})$ — волновая функция либо свободного позитрония с дискретным спектром энергий, либо состояния рассеяния частиц с непрерывным энергетическим спектром. В первом случае $N = (n, l, m)$, где квантовые числа n, l, m имеют обычный смысл, а энергии состояний даются выражением

$$\mathcal{E}_n = -\frac{m_0 e^4}{4\hbar^2 n^2}. \quad (3)$$

В общем случае энергии состояний, характеризуемых волновыми функциями (2), равны

$$E_{\mathbf{k},N} = \frac{\hbar^2 k^2}{4m_0} + E_N, \quad (4)$$

где E_N — энергия относительного движения частиц.

Поправка второго порядка к энергии невозмущенного состояния $\Psi_{\mathbf{k},100} = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R})\Phi_{100}(\mathbf{r})$ после элементарных преобразований может быть представлена в виде

$$E_{\mathbf{k}}^{(2)} = -4e^2 \sum'_{\mathbf{g},N} |V_{\mathbf{g}}|^2 \frac{|\langle 100 | \sin(\mathbf{g}\mathbf{r}/2) | N \rangle|^2}{E_N - \mathcal{E}_1 + \frac{\hbar^2 g^2}{4m_0} - \frac{\hbar^2 \mathbf{g}\mathbf{k}}{2m_0}}. \quad (5)$$

Здесь введено обозначение $|N\rangle = \Phi_N(\mathbf{r})$ и учтено, что в силу периодичности кристалла кристаллический потенциал может быть разложен в ряд Фурье, в силу чего возмущение

$$eV \left(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2} \right) - eV \left(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2} \right) = 2ie \sum_{\mathbf{g}} V_{\mathbf{g}} \sin \left(\frac{\mathbf{g}\mathbf{r}}{2} \right) e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}}, \quad (6)$$

где \mathbf{g} — вектор обратной решетки, $V_{\mathbf{g}}$ — коэффициент разложения. Штрих у знака суммы в (5) означает, что из суммирования исключены слагаемые с равным нулю знаменателем. Дифференцируя дважды

выражение для $E_{\mathbf{k}}^{(2)}$ по k и далее полагая $k = 0$, можно получить выражение для эффективной массы M позитрония. В результате имеем

$$M = 2m_0(1 - \gamma)^{-1}, \quad (7)$$

где

$$\gamma = \frac{2e^2\hbar^2}{m_0} \sum_{\mathbf{g}} |V_{\mathbf{g}}|^2 g^2 \cos^2 \theta_{\mathbf{gk}} \Gamma_g, \quad (8)$$

$$\Gamma_g = \sum_N' \frac{|\langle 100 | \sin(\mathbf{gr}/2) | N \rangle|^2}{\left(E_N - \mathcal{E}_1 + \frac{\hbar^2 g^2}{4m_0}\right)^3}. \quad (9)$$

В (8) $\theta_{\mathbf{gk}}$ — угол между векторами \mathbf{g} и \mathbf{k} . Легко заметить, что $\gamma > 0$, а следовательно, $M > 2m_0$.

3. Вся проблема расчета эффективной массы позитрония заключается в корректном вычислении параметра γ (8). В γ , согласно (9), имеется вклад от состояний $|N\rangle$, соответствующих непрерывному спектру энергий электрон-позитронной системы. Оценка этого вклада в величину M представляет собой довольно сложную задачу. Однако легко дать оценку величины M сверху. Ясно, что $(E_N - \mathcal{E}_1) \geq (\mathcal{E}_2 - \mathcal{E}_1)$. Тогда, принимая во внимание выражение (9) и то обстоятельство, что совокупность функций $|N\rangle$ образует полный ортонормированный набор, имеем

$$\Gamma_g < \tilde{\Gamma}_g, \quad \tilde{\Gamma}_g = \frac{\langle 100 | v^2 | 100 \rangle}{(\mathcal{E}_2 - \mathcal{E}_1 + a_g)^3}, \quad (10)$$

где $a_g = \hbar^2 g^2 / 2$ и $v = \sin(\mathbf{gr}/2)$. Отметим, что в силу нечетности v по \mathbf{r} матричный элемент $\langle 100 | v | 100 \rangle = 0$. Обозначим через $\tilde{\gamma}$ величину γ (8) с заменой в (8) Γ_g на $\tilde{\Gamma}_g$. В результате из (7) следует

$$M < 2m_0(1 - \tilde{\gamma})^{-1}. \quad (11)$$

Принимая во внимание явный вид водородоподобной волновой функции $|100\rangle$ с приведенной массой $m_0/2$, легко вычислить матричный элемент, входящий в $\tilde{\Gamma}_g$ (10). В результате с учетом соотношения $a_g = -a^2 g^2 \mathcal{E}_1$ и формулы (3) получаем

$$\tilde{\Gamma}_g = \frac{a^2 g^2}{2(1 + a^2 g^2)} \left(1 + \frac{1}{1 + a^2 g^2}\right) \left(\frac{3}{4} + a^2 g^2\right)^{-3} |\mathcal{E}_1|^{-3}. \quad (12)$$

Здесь $a = \hbar^2 / m_0 e^2$ — боровский радиус. Формулы (8), (11) и (12) в общем виде решают задачу о границе значения эффективной массы позитрония сверху.

Представляет интерес получить оценку значения M и снизу. Если допустить, что в сумме выражения (9) можно пренебречь вкладом от состояний $|N\rangle$ непрерывного спектра энергий, и считать, что состояния

Кристалл	$d, \text{Å}$	$M/2m_0$		
		min (14)	max (11)	Эксперимент $^{[10]}$
LiF	2.014	1.009	1.012	
LiCl	2.570	1.008	1.011	
LiBr	2.751	1.007	1.010	
LiJ	3.000	1.006	1.009	
NaF	2.317	1.009	1.011	1.50 ± 0.20
NaCl	2.820	1.007	1.010	1.37 ± 0.20
NaBr	2.989	1.006	1.009	1.90 ± 0.50
NaJ	3.237	1.005	1.008	
KF	2.674	1.007	1.010	
KCl	3.147	1.006	1.009	1.56 ± 0.15
KBr	3.298	1.005	1.009	1.36 ± 0.15
KJ	3.533	1.004	1.007	1.98 ± 0.10
RbF	2.815	1.007	1.010	
RbCl	3.291	1.005	1.009	1.90 ± 0.40
RbBr	3.445	1.004	1.007	
RbJ	3.671	1.004	1.006	

$|N\rangle$ дискретного спектра энергий образуют полный ортонормированный набор, то можно принять

$$\Gamma_g > \Gamma_g^*, \quad \Gamma_g^* = \left(\frac{\frac{3}{4} + a^2 g^2}{1 + a^2 g^2} \right)^3 \tilde{\Gamma}_g. \quad (13)$$

Тогда из (7) следует

$$M > 2m_0(1 - \gamma^*)^{-1}, \quad (14)$$

где γ^* дается выражением (8) с заменой в нем Γ_g на Γ_g^* .

4. Оставляя пока открытым вопрос о корректности оценки Γ_g снизу, выясним пределы изменения величины M в щелочно-галогидных кристаллах. Для этого необходимо конкретизировать вид фурье-компонент $V_{\mathbf{g}}$, т.е. вид кристаллического потенциала. Если принять модель потенциала точечных зарядов в решетке типа NaCl, то

$$V_{\mathbf{g}} = \frac{2\pi e}{d^3 g^2} \left[1 - (-1)^{n_1+n_2+n_3} \right], \quad (15)$$

где d — наименьшее расстояние между анионом и катионом в кристалле, а числа n_1, n_2, n_3 определяются выражением

$$\mathbf{g} = n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 + n_3 \mathbf{b}_3. \quad (16)$$

Здесь $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ — базисные векторы обратной решетки. Принимая во внимание явный их вид для решетки типа NaCl, выражение (16) удобно переписать в виде $^{[9]}$

$$\mathbf{g} = \frac{\pi}{d} \left[(n_1 - n_2 + n_3)\mathbf{x} + (n_1 + n_2 - n_3)\mathbf{y} + (-n_1 + n_2 + n_3)\mathbf{z} \right], \quad (17)$$

где $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$ — единичные ортогональные векторы, параллельные ребрам обычного куба.

С учетом выражений (12), (13), (15) и (17) оценка величин $\tilde{\gamma}$ и γ^* на основе формулы (8) не представляет труда. С хорошей точностью в сумме по векторам обратной решетки \mathbf{g} в выражении (8) можно ограничиться учетом восьми кратчайших (с длиной $\sqrt{3}\pi/d$) и восемнадцати следующих по величине (с длиной $\sqrt{11}\pi/d$) векторов с отличным от нуля вкладом. В таблице для ряда ионных кристаллов с решеткой типа NaCl приведены вычисленные по формулам (11) и (14) значения соотношения $M/2m_0$, усредненные по ориентациям [100], [110] и [111] квазиимпульса позитрония. Отметим, что анизотропия M весьма мала. Естественно, что при учете большего числа векторов обратной решетки в сумме выражения (8) мы должны были бы получить несколько большие значения, чем даны в таблице.

Определенные из эксперимента величины эффективной массы позитрония, как следует из таблицы, значительно превышают рассчитанные значения для ее верхней границы. Резкое расхождение расчета с экспериментом может быть обусловлено несколькими причинами. Возможно, что модель потенциала точечных зарядов плохо отражает истинный вид потенциала в рассмотренных кристаллах. В [7] коэффициенты потенциала $V_{\mathbf{g}}$ рассчитывались с использованием кристаллических волновых функций, вычисленных Кунцем [11]. При этом численный расчет отношения $M/2m_0$ для кристаллов NaF, NaCl и KCl с учетом 515 векторов обратной решетки и состояний свободного позитрония вплоть до значений главного квантового числа $n = 10$ привел к значениям, соответственно равным 1.014, 1.119 и 1.233. Несмотря на то что эти величины заметно меньше экспериментальных, отсюда можно заключить, что более точный учет кристаллического потенциала, действительно, может привести к увеличению эффективной массы позитрония. К сожалению, в [7] отсутствует оценка верхней границы для величины M , а ее расчет проведен в предположении несущественности состояний непрерывного энергетического спектра электрон-позитронной системы.

Нельзя исключить и того, что, возможно, в ионных кристаллах типа NaCl в основном реализуется дублонное связанное состояние электрона и позитрона. В связи с этим обратим внимание на следующее. Из расчета [7] видно, что влияние кристаллического поля на эффективную массу усиливается с ростом постоянной решетки. Однако с ростом постоянной решетки растет область междоузельного пространства, а значит, влияние кристаллического потенциала должно уменьшаться, а не увеличиваться. Это хорошо видно из рассчитанных нами значений M , приведенных в таблице. В [7] предложено следующее объяснение данному результату: сильная «деформация» позитрония с увеличением расстояния между ионами обусловлена притяжением электрона и позитрона к ионам разного знака при их движении по междоузлиям. Но это по существу означает, если такое предположение разумно, что при сильной деформации основное состояние связанной электрон-позитронной пары следует строить на основе дублонной, а не позитрониевой модели.

5. Вернемся к вопросу о более точной, чем это следует из соотношения (13), оценке нижней границы эффективной массы M . Задача заключается в корректном учете или пренебрежении вкладом в сумму выражения (8) от состояний $|N\rangle$ непрерывного энергетического спек-

ра. Эта проблема имеет общий характер и поэтому представляет интерес сама по себе. Однако важна она и с более узкой точки зрения: для оценки нижней границы эффективной массы позитрония в ионных кристаллах при использовании в расчете реалистичных кристаллических потенциалов. Из нашего расчета ясно, что модель точечных зарядов для кристаллического потенциала не согласуется с экспериментальными данными.

Нами предлагается следующий подход к решению данной задачи. Легко заметить, что

$$\frac{1}{E_N - \varepsilon_1 + a_g} = \frac{1}{a_g - \varepsilon_1} \left(1 - \frac{E_N}{E_N - \varepsilon_1 + a_g} \right). \quad (18)$$

Подставляя это выражение в формулу (9), имеем

$$\Gamma_g = \frac{\langle 100|v^2|100\rangle}{(a_g - \varepsilon_1)^3} - \frac{3}{(a_g - \varepsilon_1)^2} \sum_N \frac{E_N \langle 100|v|N\rangle \langle N|v|100\rangle}{(E_N - \varepsilon_1 + a_g)^2} - \frac{1}{(a_g - \varepsilon_1)^3} \sum_N \frac{E_N^3 \langle 100|v|N\rangle \langle N|v|100\rangle}{(E_N - \varepsilon_1 + a_g)^3}. \quad (19)$$

Вновь подставляя выражение (18) во второй член правой части выражения (19), после некоторых преобразований можно получить

$$\Gamma_g = \frac{\langle 100|v^2|100\rangle}{(a_g - \varepsilon_1)^3} - 3 \frac{\langle 100|v\mathcal{H}_0v|100\rangle}{(a_g - \varepsilon_1)^4} + \frac{2}{(a_g - \varepsilon_1)^4} \times \\ \times \sum_N \frac{E_N^2 \langle 100|v|N\rangle \langle N|v|100\rangle}{E_N - \varepsilon_1 + a_g} + \frac{4}{(a_g - \varepsilon_1)^3} \sum_N \frac{E_N^2 \langle 100|v|N\rangle \langle N|v|100\rangle}{(E_N - \varepsilon_1 + a_g)^2} + \\ + \frac{1}{(a_g - \varepsilon_1)^4} \sum_N \frac{E_N^4 \langle 100|v|N\rangle \langle N|v|100\rangle}{(E_N - \varepsilon_1 + a_g)^3}, \quad (20)$$

где

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{m_0} \Delta_{\mathbf{r}} - \frac{e^2}{r}, \quad \mathcal{H}_0|N\rangle = E_N|N\rangle. \quad (21)$$

Из (20) следует важный результат. Если в выражении (20) при расчете сумм по N пренебречь вкладом от состояний непрерывного спектра, то это может лишь уменьшить Γ_g . Обозначим данное значение Γ_g через $\Gamma_{g \min}$. Подчеркнем, что первые два члена выражения (20) получены с учетом всех состояний, соответствующих гамильтониану \mathcal{H}_0 (21). Ясно, что точно рассчитать $\Gamma_{g \min}$ с учетом всех состояний $|N\rangle$ дискретного спектра энергий практически невозможно. Однако учет конечного числа слагаемых в соответствующих суммах дает возможность корректно оценить $\Gamma_{g \min}$ снизу, а значит, позволяет корректно оценить снизу Γ_g . Очевидно, что чем больше слагаемых учитывается в суммах по состояниям $|N\rangle = |nlm\rangle$ правой части выражения (20), тем точнее оценка нижней границы $\Gamma_{g \min}$.

Простейшая оценка $\Gamma_{g \min}$ снизу состоит в учете в (20) лишь первых двух членов. Но такая оценка может быть оправдана только в том случае, если при этом соответствующее значение γ (8) будет положительным (второе слагаемое в (20) может оказаться отрицательным). Иначе необходимо включить в расчет слагаемые выражения (20), включающие суммы по состояниям дискретного спектра.

Список литературы

- [1] Hyodo T., Takakusa Y. J. Phys. Soc. Jap. **42**, 3, 1065 (1977).
- [2] Takakusa Y., Hyodo T. J. Phys. Soc. Jap. **45**, 1, 353 (1978).
- [3] Hyodo T., Takakusa Y. J. Phys. Soc. Jap. **45**, 3, 795 (1978).
- [4] Арефьев К.П., Кузнецов П.В., Боев О.В. ФТТ **23**, 6, 1877 (1981).
- [5] Сабилов Р.Х. Acta Phys. Pol. A. **60**, 4, 483 (1981).
- [6] Москвитин М.Л., Сабилов Р.Х. ФТТ **32**, 4, 966 (1990).
- [7] Боев О.В., Арефьев К.П. ФТТ **25**, 4, 1220 (1983).
- [8] Neamten S.M., Verrall R.J. Phys. Rev. **134A**, 5, 1254 (1964).
- [9] Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М. (1978).
- [10] Kasai J., Hyodo T., Fuiwara R. Proc. 7th. Int. Conf. Pos. Ann. New Delhi. Singapore (1981). P. 779.
- [11] Kunz A.B. Phys. Rev. **B4**, 2, 609 (1971).