

УДК 539.124.6

ДИФФУЗИОННАЯ МОДЕЛЬ ЗАХВАТА ПОЗИТРОНОВ ДИСЛОКАЦИЯМИ В МЕТАЛЛАХ

А. И. Козин, С. В. Макаров

Рассмотрена диффузионная модель захвата позитронов дефектами в кристаллах. На основе решения уравнения диффузии получено выражение для определения вероятности захвата позитронов дислокациями. Показано, что введение в модель члена, описывающего захват, через граничное условие приводит к более корректным результатам, чем опубликованные ранее.

Известно, что поля напряжений, создаваемые дислокациями, играют важную роль в процессах, которые происходят при пластической деформации материалов. Некоторые характеристики этих полей могут быть получены с помощью метода аннигиляции позитронов [1]. К их числу можно, в частности, отнести эффективный радиус взаимодействия позитрона с дислокацией.

Для оценки эффективных радиусов захвата позитронов такими дефектами, как дислокации, вакансии и их скопления, следует использовать диффузионную модель [2]. В работах [3-5] эта модель основывалась на уравнении диффузии термализованных позитронов следующего вида:

$$\frac{\partial n(r, t)}{\partial t} = D\nabla^2 n(r, t) - \lambda_0 n(r, t) - \mu n(r, t), \quad (1)$$

где $n(r, t)$ — плотность вероятности нахождения позитрона в точке r в момент времени t ; D — коэффициент диффузии позитронов; λ_0 — постоянная времени аннигиляции в неповрежденной области решетки; μ — скорость захвата позитронов на единицу концентрации дефектов.

Однако применение диффузионного уравнения в виде (1) в рассматриваемой задаче не совсем корректно. Действительно, член $\mu n(r, t)$, описывающий захват позитронов дефектами, фактически допускает возможность захвата в любой точке пространства, что справедливо только в приближении непрерывности распределения дефектов по объему материала. При более детальном рассмотрении необходимо учитывать, что процесс захвата имеет место на некоторой границе, которая разделяет область диффузии термализованных позитронов по матрице и аннигиляцию в ней от области локализации частицы — зонда вблизи ловушки [6]. Поэтому захват следует учитывать в модели с помощью граничных условий. Такой подход был реализован при решении задачи о захвате позитронов сферическими ловушками [7, 8]. Однако для протяженных ловушек позитронов (например, для дислокаций) аналогичного решения получено не было. Это существенно затрудняет применение метода аннигиляции позитронов для анализа дефектной структуры деформированных или облученных материалов.

В данной работе на основе решения диффузионного уравнения получено выражение для вероятности захвата позитронов краевыми дислокациями и обсуждены некоторые аспекты его использования для интерпретации экспериментальных данных.

1. Вероятность захвата позитронов дефектами

Вероятность захвата позитронов дефектами P является интегральной характеристикой и определяется выражением

$$P = (N_1 + N_2)/N, \quad (2)$$

где N — число позитронов, введенных в образец; N_1 — число термализованных позитронов, захваченных ловушкой из области диффузии; N_2 — число позитронов, термализовавшихся непосредственно в зоне захвата. Значения N , N_1 и N_2 можно найти по формулам

$$N = V \int_0^{\infty} g(t) dt, \quad N_1 = \int_0^{\infty} \mu(t) dt, \quad N_2 = V_{\text{лов}} \int_0^{\infty} g(t) dt. \quad (3)-(5)$$

Здесь V и $V_{\text{лов}}$ — объем материала, приходящийся на один дефект, и объем ловушки; $g(t)$ — объемная плотность скорости генерации позитронов; $\mu(t)$ — скорость захвата позитронов дефектами, которую можно определить следующим образом:

$$\mu(t) = \alpha S_{\text{лов}} n(r_0, t), \quad (6)$$

где α — коэффициент, характеризующий мощность захвата позитронов единицей площади поверхности ловушки; $S_{\text{лов}}$ — площадь поверхности захвата; r_0 — эффективный радиус захвата; $n(r_0, t)$ — плотность вероятности нахождения позитрона на поверхности захвата в момент времени t . Зависимость от времени величины μ обусловлена нестационарностью рассматриваемого процесса. Действительно, поскольку постоянная времени аннигиляции позитронов в матрице или дефектах, как правило, много больше скорости генерации, то за счет захвата и соответствующего уменьшения $n(r_0, t)$ скорость захвата позитронов дефектами будет функцией времени.

С учетом выражений (3)–(6) для вероятности захвата имеем

$$P = \frac{\alpha S_{\text{лов}} \int_0^{\infty} n(r_0, t) dt}{V \int_0^{\infty} g(t) dt} + \frac{V_{\text{лов}}}{V}. \quad (7)$$

Функция $n(r_0, t)$ есть решение уравнения вида

$$\frac{\partial n(r, t)}{\partial t} = D \nabla^2 n(r, t) - \lambda_0 n(r, t) + g(t) \quad (8)$$

с граничными условиями

$$D \frac{\partial n(r, t)}{\partial r} \Big|_{r_0} = \alpha n(r_0, t), \quad \frac{\partial n(r, t)}{\partial r} \Big|_R = 0, \quad (9), (10)$$

где R — межловушечный радиус Вигнера–Зейтца.

Для исключения операции дифференцирования по t в уравнении (8) воспользуемся односторонним преобразованием Лапласа, после чего получим дифференциальное уравнение вида

$$D \nabla^2 N(r, s) - (\lambda_0 + s) N(r, s) + G(s) = 0. \quad (11)$$

Здесь $N(r, s)$ и $G(s)$ — лапласовские изображения оригиналов $n(r, t)$ и $g(t)$ соответственно. Граничные условия преобразуются к следующему виду:

$$D \frac{\partial N(r, s)}{\partial r} \Big|_{r_0} = \alpha N(r_0, s), \quad \frac{\partial N(r, s)}{\partial r} \Big|_R = 0. \quad (12), (13)$$

$$\int_0^{\infty} n(r_0, t) dt = N(r_0, 0), \quad (14)$$

то выражение для вероятности захвата позитронов дефектами (7) можно переписать

$$P = \frac{\alpha S_{\text{лов}} N(r_0, 0)}{VG(0)} + \frac{V_{\text{лов}}}{V}. \quad (15)$$

Таким образом, для определения вероятности захвата позитронов дефектами достаточно решить уравнение (11) с соответствующими граничными условиями (12) и (13) при $s=0$ и подставить полученное решение для $r=r_0$ в выражение (15).

2. Захват позитронов дислокациями

Рассмотрим в качестве ловушки позитронов краевую дислокацию, которую представим в виде цилиндра радиусом r_0 и длиной l . Диффузия позитронов происходит в цилиндре той же длины l , но радиуса $R=(\pi\rho)^{-1/2}$, где ρ — плотность дислокаций. Поскольку взаимодействие позитрона с краевой дислокацией анизотропно [9], то плотность вероятности нахождения позитрона в точке r в момент времени t и мощность захвата единицей площади боковой поверхности цилиндрической ловушки будут функциями азимутального угла θ . Поэтому в цилиндрических координатах уравнение (11) для $S=0$ имеет вид

$$D\nabla^2 N(r, \theta, 0) - \lambda_0 N(r, \theta, 0) + G(0) = 0. \quad (16)$$

Соответствующие граничные условия по аналогии с (12) и (13) можно записать следующим образом:

$$D \left. \frac{\partial N(r, \theta, 0)}{\partial r} \right|_{r_0} = \alpha(\theta) N(r_0, \theta, 0), \quad \left. \frac{\partial N(r, \theta, 0)}{\partial r} \right|_R = 0. \quad (17), (18)$$

Для упрощения решения (16)–(18) воспользуемся довольно разумным, на наш взгляд, приближением, которое заключается в усреднении по углу θ плотности вероятности нахождения позитрона в точке r и коэффициента $\alpha(\theta)$. Такое усреднение достаточно правомерно для поликристаллических образцов. В результате уравнение (16) преобразуется к виду

$$\frac{d^2 \bar{N}(r, 0)}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\bar{N}(r, 0)}{dr} - \frac{\lambda_0}{D} \bar{N}(r, 0) + \frac{G(0)}{D} = 0 \quad (19)$$

с граничными условиями (17) и (18), в которые будут входить усредненные по углу θ величины $\bar{N}(r, 0)$ и $\bar{\alpha}$.

Перейдем к новой переменной

$$\Phi(x, 0) = \bar{N}(r, 0) - \beta, \quad (20)$$

где $x=kr$, $k=1/L$, диффузионная длина $L=(D\tau_0)^{1/2}$, время жизни позитронов в матрице $\tau_0=1/\lambda_0$ и $\beta=G(0)/\lambda_0$. После подстановки (20) в (19) получим модифицированное уравнение Бесселя

$$\frac{d^2 \Phi(x, 0)}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{d\Phi(x, 0)}{dx} - \Phi(x, 0) = 0 \quad (21)$$

с граничными условиями

$$kD \left. \frac{d\Phi(x, 0)}{dx} \right|_{x_0} = \bar{\alpha} \left[\Phi(x_0, 0) + \frac{G(0)}{\lambda_0} \right], \quad \left. \frac{d\Phi(x, 0)}{dx} \right|_x = 0. \quad (22), (23)$$

Общее решение уравнения (21) имеет вид

$$\Phi(x, 0) = A_1 I_0(x) + A_2 K_0(x), \quad (24)$$

где $I_n(x)$ и $K_n(x)$ — модифицированные функции Бесселя. Воспользовавшись для определения коэффициентов A_1 и A_2 граничными условиями (22) и (23), с учетом (20) получим

$$N(r_0, 0) = \frac{G(0)}{\lambda_0} \left[\frac{I_1(kr_0) - \gamma K_1(kr_0)}{I_1(kr_0) - \gamma K_1(kr_0) - \frac{\bar{\alpha}L}{D} I_0(kr_0) - \frac{\bar{\alpha}L}{D} \gamma K_0(kr_0)} \right], \quad (25)$$

$$\gamma = I_1(kR)/K_1(kR).$$

Отсюда для вероятности захвата позитронов дислокациями получаем следующее выражение:

$$P = \frac{\bar{\alpha}S_{\text{лов}}}{\lambda_0 V} \left[\frac{I_1(kr_0) - \gamma K_1(kr_0)}{I_1(kr_0) - \gamma K_1(kr_0) - \frac{\bar{\alpha}L}{D} I_0(kr_0) - \frac{\bar{\alpha}L}{D} \gamma K_0(kr_0)} \right] + \left(\frac{r_0 + \lambda}{R} \right)^2. \quad (26)$$

Значение $\bar{\alpha}$ можно найти с помощью формулы, данной в работе [8] для сферической ловушки, подставив в нее поперечное сечение захвата для цилиндра

$$\bar{\alpha}S_{\text{лов}} = 2v_+ (r_0 + \lambda) \xi \xi, \quad (27)$$

где v_+ — тепловая скорость позитронов; λ — длина волны свободного термализованного позитрона; ξ — усредненный по углу θ коэффициент поглощения, равный

$$\xi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \omega(\theta) d\theta. \quad (28)$$

Здесь $\omega(\theta)$ — так называемая «вероятность прилипания», определяемая потенциалом взаимодействия позитрона с дислокацией. Для рассматриваемой задачи в качестве такого потенциала обычно используется потенциал линейного диполя краевой дислокации [9, 10]

$$V(r, \theta) = -CE_F \frac{b(1-2\nu) \sin \theta}{2\pi(1-\nu)r}, \quad (29)$$

C — константа; E_F — энергия Ферми; b — вектор Бюргерса; ν — коэффициент Пуассона. Для притягивающей части потенциала вида $1/r$ «вероятность прилипания» становится равной единице при $U/k_B T > 4$ [11, 12], где U — энергия связи позитрона с дислокацией, k_B — постоянная Больцмана, T — температура. Поскольку характерное значение энергии связи позитрона с дислокацией в металлах порядка 1 эВ [1], а кинетическая энергия теплового движения позитронов при комнатной температуре составляет 0.025 эВ, то для притягивающей части потенциала вида (29) практически всегда $\omega(\theta) = 1$. Что касается отталкивающей части этого потенциала, то для нее «вероятность прилипания» будет определяться квантовомеханическим эффектом проникновения частицы через барьер и равна [13]

$$\omega(\theta) = \exp[-2g(\theta)f(\theta)], \quad (30)$$

где

$$g(\theta) = \frac{r_c}{\hbar} [2mV(r_c, \theta)]^{1/2}, \quad f(\theta) = \left[\frac{V(r_c, \theta)}{E_{\text{кин}}} \right]^{1/2} \arccos \left[\frac{E_{\text{кин}}}{V(r_c, \theta)} \right]^{1/2} - \left[1 - \frac{E_{\text{кин}}}{V(r_c, \theta)} \right]^{1/2}.$$

Здесь r_c — радиус ядра дислокации, $E_{\text{кин}}$ — кинетическая энергия термализованного позитрона.

Таким образом, подставляя (30) в (28) и интегрируя по углу θ с учетом значения «вероятности прилипания» для притягивающей части потенциала взаимодействия, мы можем определить с помощью формулы (27) коэффициент $\bar{\alpha}$.

3. Результаты расчета вероятности захвата позитронов дислокациями в деформированной меди

На рисунке изображена рассчитанная по формуле (26) зависимость вероятности захвата позитронов от плотности дислокаций в деформированной меди. При расчете были использованы постоянные: $D \approx 4 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$ [3], $\tau_0 = 120 \text{ пс}$ [4],

$C=0.667$ [9], $E_F=7.0$ эВ [14], $b=0.256$ нм [15] и $\nu=0.368$ [16]. Значение r_c по аналогии с работой [1] выбрано равным половине ширины ядра дислокации из модели Пайерлса—Набарро, т. е. $r_c=a/2(1-\nu)\approx 0.286$ нм, где $a=0.361$ нм — постоянная решетки для меди. После численного интегрирования (28) мы получили $\xi=0.568$. Точками на рисунке показаны экспериментальные данные по зависимости второй компоненты спектра времени жизни I_2 от плотности дислокаций в меди из работы [4]. Пересчет в вероятность захвата проводился с помощью следующего соотношения [7]

$$I_2 = \frac{\tau_2}{\tau_2 + (P-1)\tau_0} P, \quad (31)$$

где τ_2 — время жизни позитронов, локализованных в ловушках.

Как видно из рисунка, удовлетворительное соответствие модельной зависимости экспериментальным результатам получается при значении эффективного радиуса захвата позитронов дислокациями, равного $5a$. Полученное в работе [3] значение $r_0\approx 20a$ объяснялось авторами действием потенциала притяжения [9]. В качестве критерия дальнего действия этого потенциала было выбрано превышение потенциалом взаимодействия позитрона с дислокацией (29) значимой энергии теплового движения. Мы оценили по указанному критерию величину эффективного радиуса захвата и получили $r_0\approx 6a$. Этот результат является дополнительным аргументом того, что оценки характеристик захвата позитронов дислокациями, проводимые по предлагаемой в данной работе методике анализа, более корректны, чем опубликованные в работах [3, 4].

В заключение авторы выражают благодарность Д. К. Даукееву и Ш. Ш. Ибрагимову за ценные критические замечания при обсуждении работы.

Литература

- [1] Shen J. Q., Lung C. W., Wang K. L. Phys. Status Solidi (b), 1986, v. 134, N 1, p. 97—102.
- [2] Brandt W., Paulin R. Phys. Rev. B: Condens. Matter., 1972, v. 5, N 7, p. 2430—2435.
- [3] Brandt W., Paulin R., Dauwe C. Phys. Lett., 1974, v. A48, N 6, p. 480—482.
- [4] Hinode K., Tanigawa Sh., Doyama M. J. Phys. Soc. Jap., 1976, v. 41, N 6, p. 2037—2042.
- [5] Dekhtyar M. I. Phys. Status Solidi (a), 1975, v. 31, N 2, p. 699—705.
- [6] Hodges C. H. J. Phys. F: Metal Phys., 1974, v. 4, N 11, p. L230—L235.
- [7] Ewerstowski R., Rozenfeld B., Swiatkowski W. Acta Phys. Pol., 1984, v. A66, N 2, p. 139—148.
- [8] Nieminen R. M., Laakkonen J., Hautajarvi P., Vehanen A. Phys. Rev. B: Condens. Matter., 1979, v. 19, N 3, p. 1397—1402.
- [9] Hautajarvi P. Solid State Comm., 1972, v. 11, N 8, p. 1049—1052.
- [10] Landauer R. Phys. Rev., 1954, v. 94, N 5, p. 1386—1388.
- [11] Lax M. Phys. Rev., 1960, v. 119, N 5, p. 1502—1523.
- [12] Бургуян Ж., Ланно М. Точечные дефекты в полупроводниках. Экспериментальные аспекты. М.: Мир, 1985. 300 с.
- [13] Блатт Дж., Вайскопф В. Теоретическая ядерная физика. М.: ИЛ, 1954. 658 с.
- [14] Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. М.: Мир, 1979, т. 1. 399 с.
- [15] Орлов А. Н. Введение в теорию дефектов в кристаллах. М.: Высшая школа, 1983. 144 с.
- [16] Таблицы физических величин. Справочник / Под ред. И. К. Кикоина. М.: Атомиздат, 1976. 1008 с.

Институт ядерной физики
АН КазССР
Алма-Ата

Поступило в Редакцию
30 июля 1987 г.