

СВЕРХТОНКАЯ СТРУКТУРА УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ ПОЗИТРОНИЯ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ ПОЛЕ

А. З. Варисов

Проведен анализ поведения уровней энергии сверхтонкой структуры атома позитрония в кристаллическом поле в присутствии внешнего магнитного поля. Для «изотропного» позитрония, если эффективные массы позитрона и электрона неодинаковы, наряду с квадратичным по магнитному полю расщеплением имеет место линейный эффект Зеемана (для уровней ортопозитрония с $m = \pm 1$). Для «анизотропного» позитрония в аксиальном кристаллическом поле характер расщепления зависит от взаимной ориентации магнитного поля и оси симметрии кристаллического поля. Особенности сверхтонкой структуры атома позитрония в кристаллическом поле могут проявиться в опытах по наблюдению прецессии вектора поляризации позитрония в магнитном поле и должны приводить к анизотропии магнитного тушения позитрония в ориентированных кристаллах.

Опыт показывает, что в полупроводниках, ионных и молекулярных кристаллах, полимерах позитроний может находиться в двух состояниях: делокализованном и локализованном (в междоузлиях, на дефектах). В твердых телах позитроний испытывает действие кристаллического поля, величина и симметрия которого зависят от состояния, в котором находится позитроний, а для локализованного позитрония — от области локализации. Смещение уровня энергии основного состояния позитрония, обусловленное возмущающим действием кристаллического поля, мы здесь не рассматриваем [1, 2]. Заметим только, что из-за нечетности возмущающего потенциала относительно перестановки электрона и позитрона (в координатном пространстве), поправки нечетного порядка (а значит, и первого порядка) теории возмущений равны нулю.

Анализ сверхтонкой структуры уровней энергии (основного состояния) позитрония в кристаллическом поле, как и для мюония [3], удобно провести методом спин-гамильтониана. Запишем гамильтониан сверхтонкого взаимодействия для атома Ps в виде [4]

$$H_{\text{ств}} = 2\pi\mu_e\mu_p \left[3 + \frac{7}{3} (\sigma_e\sigma_p) \right] \delta(\mathbf{r}) + \frac{\mu_e\mu_p}{r^3} [3 (\sigma_e\mathbf{n})(\sigma_p\mathbf{n}) - (\sigma_e\sigma_p)], \quad (1)$$

где μ_e и μ_p — магнитные моменты электрона и позитрона, σ_e и σ_p — матрицы Паули, \mathbf{n} — единичный вектор в направлении вектора \mathbf{r} . В кристалле следует заменить массы электрона и позитрона на эффективные массы: m_e и m_p [5]. При этом, если измерять m_e и m_p в единицах массы электрона m_0 в вакууме,

$$\mu_e = \frac{1}{m_e} \mu_0, \quad \mu_p = \frac{1}{m_p} \mu_0, \quad \mu_e\mu_p = \frac{1}{m_e m_p} \mu_0^2, \quad (2)$$

где μ_0 — магнетон Бора.

Далее необходимо усреднить гамильтониан (1) по орбитальным волновым функциям. Симметрией возмущающего кристаллического поля определяется конкретный вид разложения потенциала поля по сферическим гармоникам $V(r) = \sum_k A_k^q r^k Y_k^q(\theta, \varphi)$, и, следовательно, набор орбитальных волновых функций из $\psi_{nlm}(\mathbf{r})$, которые будут примешиваться к волновой функции рассматриваемого состояния. Так, для основного состояния атома Ps в аксиальном кристалли-

ческом поле, если выбрать ось симметрии поля в качестве оси z , усреднение гамильтониана (1) дает

$$H = \varepsilon_0 + \varepsilon_{\parallel} (\sigma_e^z \sigma_p^z) + \varepsilon_{\perp} (\sigma_e^x \sigma_p^x + \sigma_e^y \sigma_p^y), \quad (3)$$

где $\varepsilon_0 = 6\pi\mu_e\mu_p |\psi(0)|_m^2$ — специфический для позитрония член, обусловленный обменным взаимодействием Баба; ε_{\parallel} и ε_{\perp} — компоненты тензора сверхтонкого расщепления; для «изотропного» позитрония $\varepsilon_{\parallel} = \varepsilon_{\perp} = (14/3)\mu_e\mu_p |\psi(0)|_m^2$. Здесь $|\psi(0)|_m^2$ — электронно-позитронная плотность «в нуле» в атоме Ps (в основном состоянии) в веществе. Анизотропия гамильтониана (3) возникает вследствие примешивания к функции ψ_{100} функций ψ_{nlm} с $l \neq 0$.

При наличии внешнего магнитного поля B к гамильтониану (3) необходимо добавить член, учитывающий взаимодействие атома Ps с магнитным полем, так что спин-гамильтониан будет иметь вид

$$H_{\text{сп}} = \varepsilon_0 + \varepsilon_{\parallel} (\sigma_e^z \sigma_p^z) + \varepsilon_{\perp} (\sigma_e^x \sigma_p^x + \sigma_e^y \sigma_p^y) + (\mu_p \sigma_p - \mu_e \sigma_e) B. \quad (4)$$

Для определения уровней энергии сверхтонкого взаимодействия выберем ось симметрии как ось квантования. В качестве базиса возьмем спиновые функции, описывающие состояния атома Ps с заданным полным спином S и его проекцией S_z

$$\chi_{11} = |+\rangle, \quad \chi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle), \quad \chi_{1-1} = |-\rangle, \quad \chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle - |-\rangle). \quad (5)$$

Первый знак относится к спину электрона, а второй — к спину позитрона. Секулярное уравнение имеет вид

$$\begin{vmatrix} E_{11} + (1 - \xi)\varepsilon_z - \varepsilon & \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - \xi)\varepsilon_{-} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \xi)\varepsilon_{-} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - \xi)\varepsilon_{+} & E_{10} - \varepsilon & \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - \xi)\varepsilon_{-} & (1 + \xi)\varepsilon_z \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - \xi)\varepsilon_{-} & E_{1-1} - (1 - \xi)\varepsilon_z - \varepsilon & \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \xi)\varepsilon_{+} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \xi)\varepsilon_{+} & (1 + \xi)\varepsilon_z & \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \xi)\varepsilon_{-} & E_{00} - \varepsilon \end{vmatrix} = 0, \quad (6)$$

где $\xi = \mu_p/\mu_e = m_e/m_p$, $\varepsilon_z = \mu_e B_z$, $\varepsilon_{\pm} = \mu_e (B_x \pm iB_y)$; $E_{11} = E_{1-1} = \varepsilon_0 + \varepsilon_{\parallel}$, $E_{10} = \varepsilon_0 - \varepsilon_{\parallel} + 2\varepsilon_{\perp}$, $E_{00} = \varepsilon_0 - \varepsilon_{\parallel} - 2\varepsilon_{\perp}$. Нетрудно видеть, что E_{11} , E_{10} , E_{1-1} и E_{00} являются спиновыми уровнями энергии при отсутствии внешнего магнитного поля ($B=0$). В отличие от изотропного случая, как и следовало ожидать из теоретико-групповых соображений, учитывая симметрию поля, уровень ортопозитрония расщепляется на невырожденный ($m=0$) и двукратно вырожденный ($m=\pm 1$) подуровни: соответственно E_{10} и E_{11} . Величина расщепления составляет $2(\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{\parallel})$, а его знак зависит от соотношения между ε_{\perp} и ε_{\parallel} .

Рассмотрим некоторые частные случаи. Пусть все действие кристаллического поля проявляется в изменении масс электрона и позитрона атома Ps по сравнению со свободными частицами, причем $m_p \neq m_e$ (например, делокализованный атом Ps большого радиуса в периодическом поле кристаллической решетки). Внешнее магнитное поле постоянно и однородно, так что $B_z = B$, $B_x = B_y = 0$. В этом (изотропном) случае в (6)

$$E_{11} = E_{10} = E_{1-1} \equiv {}^3\varepsilon_1 = \frac{32}{3} \pi\mu_e\mu_p |\psi(0)|_m^2, \quad E_{00} \equiv {}^1\varepsilon_0 = -8\pi\mu_e\mu_p |\psi(0)|_m^2, \quad (7)$$

а разность

$$\Delta E = {}^3\varepsilon_1 - {}^1\varepsilon_0 = \frac{56}{3} \pi\mu_e\mu_p |\psi(0)|_m^2. \quad (8)$$

Очевидно, $|\psi(0)|_m^2 = 8 \left(\frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \right)^3 |\psi(0)|^2$, где $|\psi(0)|^2$ — значение электронно-позитронной плотности «в нуле» в атоме Ps при $m_e = m_p = 1$ (вообще говоря, $|\psi(0)|^2$ все еще может заметно отличаться от своего вакуумного значе-

ния $|\psi(0)|_0^2$, например, из-за экранирования взаимодействия между электроном и позитроном в веществе). Поэтому ${}^3\varepsilon_1$ и ${}^1\varepsilon_0$ и ΔE отличаются от своих значений при $m_e = m_p = 1$ фактором $8m_e^2 m_p^2 / (m_e + m_p)^3$. Так например, $\Delta E = [8m_e^2 m_p^2 / (m_e + m_p)^3] \Delta E'$, где $\Delta E'$ — превышение энергии триплетного состояния над синглетным при $m_e = m_p = 1$. Спиновые уровни энергии определяются согласно (6) выражениями

$$\varepsilon_{1,3} = {}^3\varepsilon_1 \pm (1 - \xi) \mu_e B, \quad \varepsilon_{2,4} = \frac{{}^3\varepsilon_1 + {}^1\varepsilon_0}{2} \pm \frac{\Delta E}{2} \sqrt{1 + x^2}, \quad (9)$$

где

$$x = \frac{2(\mu_e + \mu_p)B}{\Delta E} = \frac{(1 + \xi)^4 4\mu_p B}{16\xi^3 m_e^3 \Delta E'}. \quad (10)$$

Волновые функции имеют вид

$$\chi_1 = \chi_{11}, \quad \chi_2 = \frac{1}{\sqrt{1 + y^2}} (\chi_{10} + y\chi_{00}), \quad \chi_3 = \chi_{1-1}, \quad \chi_4 = \frac{1}{\sqrt{1 + y^2}} (\chi_{00} - y\chi_{10}), \quad (11)$$

где $y = (\sqrt{1 + x^2} - 1)/x$. Таким образом, наряду с квадратичным эффектом Зеемана (уровни ε_2 и ε_4) имеет место линейный эффект (уровни ε_2 и ε_3) (рис. 1).

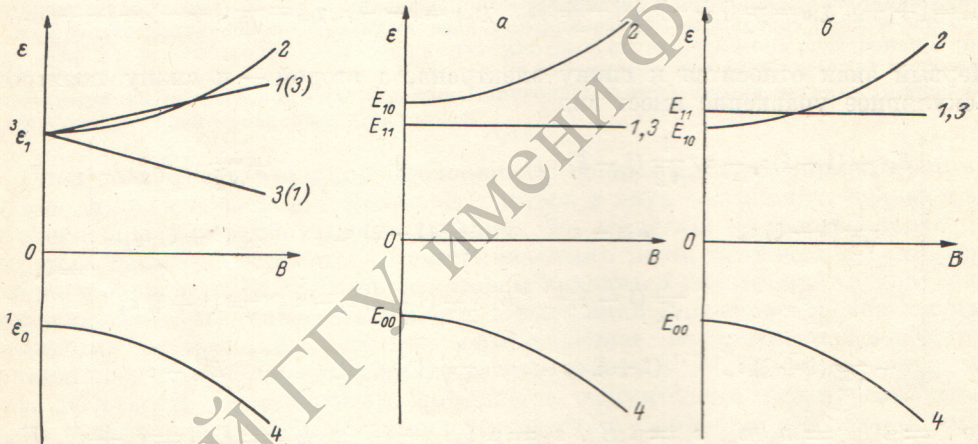


Рис. 1. Схема поведения спиновых уровней энергии «изотропного» позитрония в магнитном поле при $m_e < m_p$ ($m_e > m_p$).

Рис. 2. Схема поведения спиновых уровней энергии позитрония в магнитном поле, параллельном оси симметрии кристаллического поля ($m_e = m_p$).

$$a - \varepsilon_{\perp} > \varepsilon_{\parallel}, \quad b - \varepsilon_{\perp} < \varepsilon_{\parallel}.$$

Смешивание состояний ортопозитрония с $m=0$ и парапозитрония (т. е. χ_{10} и χ_{00}) обуславливает магнитное тушение позитрония [6].

Рассмотрим теперь случай, когда атом Ps находится в аксиальном кристаллическом поле (полагая для простоты $\mu_e = \mu_p = \mu$, т. е. $\xi = 1$).

Если $B_z = B$, $B_x = B_y = 0$, то согласно (6) получим для спиновых уровней энергии выражения

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = E_{11}, \quad \varepsilon_{2,4} = \frac{E_{10} + E_{00}}{2} \pm \frac{\Delta E_{\parallel}}{2} \sqrt{1 + x_{\parallel}^2}, \quad (12)$$

где $\Delta E_{\parallel} = E_{10} - E_{00} = 4\varepsilon_{\perp}$, а $x_{\parallel} = 4\mu B / \Delta E_{\parallel}$. Волновые функции имеют вид (11) с заменой y на $y_{\parallel} = (\sqrt{1 + x_{\parallel}^2} - 1)/x_{\parallel}$. Схема расщепления уровней энергии показана на рис. 2.

Если магнитное поле перпендикулярно к оси симметрии кристаллического поля $B_y = B_z = 0$, $B_x = B$, то

$$\varepsilon_1 = E_{11}, \quad \varepsilon_2 = E_{10}, \quad \varepsilon_{3,4} = \frac{E_{11} + E_{00}}{2} \pm \frac{\Delta E_{\perp}}{2} \sqrt{1 + x_{\perp}^2}, \quad (13)$$

где $\Delta E_{\perp} = E_{11} - E_{00} = 2(\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp})$, а $x_{\perp} = 4\mu B / \Delta E_{\perp}$. Волновые функции имеют вид

$$\begin{aligned} \chi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{11} + \chi_{1-1}), & \chi_2 &= \chi_{10}, & \chi_3 &= \frac{1}{\sqrt{1+y_{\perp}^2}} \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{1-1} - \chi_{11}) + y_{\perp} \chi_{00} \right], \\ \chi_4 &= \frac{1}{\sqrt{1+y_{\perp}^2}} \left[\chi_{00} - \frac{1}{\sqrt{2}} y_{\perp} (\chi_{1-1} - \chi_{11}) \right], \end{aligned} \quad (14)$$

где $y_{\perp} = (\sqrt{1+x_{\perp}^2} - 1)/x_{\perp}$. Схема расщепления уровней показана на рис. 3.

Не останавливаясь на других случаях, перейдем к обсуждению возможных проявлений в опыте особенностей поведения уровней сверхтонкой структуры атома Ps в кристаллическом поле.

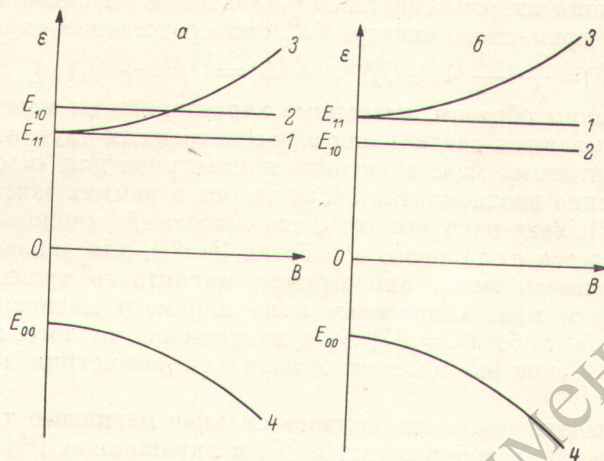


Рис. 3. Схема поведения спиновых уровней энергии позитрония в магнитном поле, перпендикулярном оси симметрии кристаллического поля ($m_e = m_p$).

$a - \varepsilon_{\perp} > \varepsilon_{\parallel}$, $b - \varepsilon_{\perp} < \varepsilon_{\parallel}$.

В работе [7] было высказано предположение о возможности наблюдения прецессии вектора поляризации позитрония в магнитном поле по аналогии с опытами по наблюдению временной зависимости поляризации μ^+ -мезонов в магнитных полях [8]. Наличие прецессии вследствие анизотропии углового распределения продуктов распада частицы со спином единица — ортопозитрония — должно приводить к биециям во времени скорости счета, например, в опытах по регистрации задержанных совпадений ядерного γ -кванта (1.28 МэВ), сопровождающего испускание позитрона ядром Na^{22} , и аннигиляционных 3γ -квантов [7]. В случае «изотропного» позитрония с $m_e = m_p$ должна наблюдаться одночастотная прецессия с частотой $\hbar\omega = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$, 3 , для «изотропного» позитрония с $m_e \neq m_p$ — двухчастотная прецессия с частотами $\hbar\omega_{12} = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$ и $\hbar\omega_{32} = \varepsilon_2 - \varepsilon_3$ (9) и, наконец, для «анизотропного» позитрония — также двухчастотная прецессия, но с другими частотами $\hbar\omega'_{12} = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$ и $\hbar\omega'_{32} = \varepsilon_2 - \varepsilon_3$ (см. (13) и ср. рис. 1 и 3), либо одночастотная с частотой $\hbar\omega' = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$, 3 ((12) и рис. 2). Для «анизотропного» позитрония частоты существенно зависят от величины и знака разности $\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{\parallel}$ (рис. 2 и 3), а для «изотропного» позитрония — от отношения между эффективными массами позитрона и электрона, т. е. от $\xi = m_e/m_p$.

Претерпевают изменение и характеристики магнитного тушения позитрония. Во всех рассмотренных выше случаях вероятность (скорость) спонтанной аннигиляции позитрония в смешанных состояниях, возникающих из синглетного и триплетного состояний, соответственно равны, как это следует из (11), (12) и (14),

$$\lambda_s = \frac{\lambda_s^m + y_k^2 \lambda_s^m}{1 + y_k^2}, \quad \lambda_t = \frac{\lambda_t^m + y_k^2 \lambda_s^m}{1 + y_k^2}, \quad (15)$$

где $y_k = y$ (в случае (11)), y_{\parallel} (в случае (12)) либо y_{\perp} (в случае (14)) и т. д.; λ_s^m и λ_t^m — скорости самоаннигиляции соответственно пара- и орто-позитрония

в исследуемом веществе в отсутствие магнитного поля (так как λ_s^m и $\lambda_t^m \sim |\psi(0)|_{m^2}^2$, то указанные величины естественно отличаются от их вакуумных значений λ_s^0 и λ_t^0). Ортопозитроний в состояниях, не содержащих примеси синглетного состояния, аннигилирует со скоростью λ_t^m .

В случае не очень сильных магнитных полей, а именно $y_k^2 \ll 1$, когда тушение позитрония, вызванное его взаимодействием с веществом, происходит путем pick-off аннигиляции [9], магнитное тушение может быть охарактеризовано параметром [6] $Q_k = y_k^2 \lambda_s^m / \lambda_t$, где λ_t — постоянная распада долгоживущей компоненты временного спектра аннигиляции позитронов в веществе. Измеряемые в опытах по магнитному тушению позитрония относительные уменьшения вероятности 3γ -аннигиляции (w), усиление узкой компоненты в кривых угловой корреляции аннигиляционных γ -квантов (\mathcal{E}) и подавление долгоживущей компоненты временного спектра (R) непосредственно определяются параметром Q [6] $w(B) = \frac{2}{3} + \frac{1}{3}(1 + Q_k)^{-1}$, $\mathcal{E}(B) = Q_k / (1 + Q_k)$ и $R(B) = (1/3)[2 + \exp(-Q_k)]$. Таким образом, названные характеристики магнитного тушения позитрония оказываются различными в рассмотренных случаях. Помимо зависимости от эффективных масс электрона и позитрона для «изотропного» позитрония (это явление неоднократно обсуждалось в рамках «экситонной» модели позитрония [5, 10], хотя надо заметить, что «массовый» множитель справа в (10) несколько отличается от такового в работах [5, 10]), для «анизотропного» позитрония должна иметь место анизотропия магнитного тушения позитрония. Так, в аксиальном кристаллическом поле параметр магнитного тушения Q_k равен $Q_{\parallel} = y_{\parallel}^2 \lambda_s^m / \lambda_t$ либо $Q_{\perp} = y_{\perp}^2 \lambda_s^m / \lambda_t$ в зависимости от того, параллельно или перпендикулярно внешнее магнитное поле оси симметрии кристаллического поля.

Между тем наблюдаемое «аномально» сильное магнитное тушение позитрония в твердых телах (в неокрашенных [11] и окрашенных [12] щелочно-галогидных кристаллах, в необлученных и облученных (электронами) монокристаллах кремния n -типа [13], в полимерах [14]) лишь частично может быть обусловлено особенностями сверхтонкой структуры позитрония, обсуждавшимися выше. Указанная «аномалия» связана, по-видимому, как и предполагается в [11–14], преимущественно с отличием $|\psi(0)|_m^2$ (также и в том случае, если $m_e = m_p = 1$) от $|\psi(0)|_0^2$; как следует из опыта, $|\psi(0)|_m^2 / |\psi(0)|_0^2 = \alpha < 1$. Дело в том, что такие характеристики позитрония, как ΔE_k , λ_s^m и λ_t^m , определяются величиной $|\psi(0)|_m^2$. Отсюда возникает зависимость параметра магнитного тушения Q_k от $|\psi(0)|_m^2$. В не очень сильных полях, когда $x_k^2 \ll 1$, $Q_k \approx \frac{x_k^2 \lambda_s^m}{4 \lambda_t}$. Так как $\Delta E_k \sim |\psi(0)|_m^2$ и $\lambda_s^m \sim |\psi(0)|_m^2$, то, учитывая (2), получим $Q_k \approx \frac{(m_e + m_p)^2}{4\alpha} Q_0$, где Q_0 — вакуумное значение параметра магнитного тушения (из $|\psi(0)|_m^2$ «массовый» множитель здесь не выделен). Если $m_e = m_p = 1$, то $Q_k \approx (|\psi(0)|_0^2 / |\psi(0)|_m^2) Q_0 = \frac{1}{\alpha} Q_0$. Заметим, что для «анизотропного» позитрония ΔE_k содержит добавочные члены, не зависящие от $|\psi(0)|_m^2$, так что для такого позитрония соотношение $Q_k \sim \alpha^{-1}$ имеет место, если указанные члены отбросить.

Литература

- [1] S. M. Neamten, R. I. Verral. Phys. Rev., 134A, 1254, 1964.
- [2] Г. М. Бартенев, А. З. Варисов, А. В. Иванова, М. Н. Плетнев, Е. П. Прокопьев, А. Д. Цыганов. ФТТ, 14, 715, 1972.
- [3] Ю. М. Белоусов, В. Н. Горелкин, В. П. Смилга. ЖЭТФ, 74, 629, 1978; 75, 1999, 1978.
- [4] А. И. Ахизер, В. Б. Берестецкий. Квантовая электродинамика. ГИФМЛ, М., 1979.
- [5] В. И. Гольданский, Е. П. Прокопьев. Письма ЖЭТФ, 4, 422, 1966; ФТТ, 13, 2955, 1971.
- [6] А. З. Варисов, Ф. М. Набиуллина. Опт. и спектр., 46, 448, 1979.
- [7] В. Г. Барышевский. ДАН БССР, 20 212, 1976.
- [8] И. И. Гуревич, И. Г. Ивантер, Е. А. Мелешко, Б. А. Никольский, В. С. Роганов, В. И. Селиванов, В. П. Смилга, Б. В. Соколов, В. Д. Шестаков. ЖЭТФ, 60, 471, 1971.

- [9] В. И. Гольданский. Физическая химия позитрона и позитрония. «Наука», М., 1968.
- [10] Е. П. Прокопьев. ФТТ, 19, 472, 1977; ХВЭ, 12, 172, 1978.
- [11] A. Bisi, A. Durasquier, L. Zappa. J. Phys., C4, 311, 1971; C6, 1125, 1973.
- [12] A. Bisi, L. Bosi, A. Durasquier, L. Zappa. Phys. St. Sol., B69, 515, 1975.
- [13] К. П. Арефьев, С. А. Воробьев, Е. П. Прокопьев, А. А. Цой. ФТТ, 19, 1339, 1977.
- [14] M. Bertolaccini, A. Bisi, G. Gamborini, L. Zappa. J. Phys., C7, 3827, 1974.

Поступило в Редакцию 27 августа 1979 г.
В окончательной редакции 28 сентября 1981 г.

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ имени Ф. Скоринь