

УДК 539.189.2

ФИЗИКА

Член-корреспондент АН СССР В. И. ГОЛЬДАНСКИЙ, Б. М. ЛЕВИН,
В. А. ПАЗДЗЕРСКИЙ, В. П. ШАНТАРОВИЧ

ОРТО-ПАРАКОНВЕРСИЯ ПОЗИТРОНИЯ ВБЛИЗИ ГРАНИЦЫ МЕТАЛЛ — ДИЭЛЕКТРИК

Как известно, спонтанные переходы между орто- ($S=1$) и парасостоянием ($S=0$) позитрония запрещены в силу сохранения CP -инвариантности в электромагнитных переходах ⁽¹⁾. Взаимодействие с веществом или с магнитным полем частично снимает запрет, и ортопозитроний может аннигилировать на два γ -кванта, что приводит к сокращению его средней продолжительности жизни (тушение). Один из наиболее эффективных механизмов тушения состоит в орто-параконверсии позитрония ⁽²⁾. До сих пор этот процесс связывают исключительно с наличием в веществе парамагнитных центров ⁽³⁾, в частности, как показано в последнее время, с присутствием метастабильных (триплетных) возбужденных состояний ⁽⁴⁾.

Цель этой статьи состоит в установлении не рассмотренной до сих пор возможности орто-параконверсии позитрония вблизи поверхности металла.

Если позитроний локализован в дефектной диэлектрической матрице (например, позитроний в поре ⁽⁵⁾) и при этом находится рядом с поверхностью металлической фазы, то это стимулирует орто-параконверсию посредством прямого электронного обмена с электронами металла вблизи поверхности Ферми, поскольку волновая функция свободных электронов простирается за границу металла на расстояние порядка атомных размеров. В случае эффективности такого обмена будет происходить конверсионное тушение позитрония на границе металл — диэлектрик, что может быть обнаружено в эксперименте.

Очевидно, орто-параконверсия в этом случае не связана с наличием неспаренного спина в ближайшем окружении позитрония, а обусловлена исчезающе малым различием энергии вакантных и заполненных уровней электронов в зоне проводимости металла, так что энергетически переход с обменом электронами может быть обеспечен даже при нулевой температуре ($T=0$) за счет энергии расщепления основного состояния орто- и паразитрония ($\Delta W=8,4 \cdot 10^{-4}$ эв) ⁽¹⁾.

Проведем приближенный расчет нового процесса орто-параконверсии. Рассмотрим позитроний, локализованный в среднем на расстоянии R от поверхности металла (рис. 1); $\mathbf{R}=1/2(\mathbf{r}_++\mathbf{r}_-)$, где $\mathbf{r}_+$ и $\mathbf{r}_-$ — координаты позитрона и электрона в позитронии, $\mathbf{p}$ — координаты электрона металла. Переход вызывает кулоновское взаимодействие электрона металла с электроном и позитроном в позитронии:

$$V = \frac{e^2}{|\mathbf{p}-\mathbf{r}_-|} - \frac{e^2}{|\mathbf{p}+\mathbf{r}_--2\mathbf{R}|}, \quad (1)$$

где e — заряд электрона.

Обозначая через $\psi(\mathbf{p})$ волновую функцию электрона металла, а через $\varphi(\mathbf{r})$ — волновую функцию электрона позитрония, вычислим обменный интеграл между начальным $\varphi(\mathbf{r})\psi(\mathbf{p})$ и конечным $\varphi(\mathbf{p})\psi(\mathbf{r})$ состояниями (здесь и в дальнейшем опускаем индекс «—» в обозначении координат электрона). Поскольку поле не проникает внутрь металла, то для обмена

существенна только волновая функция электронов металла при $z \geq 0$, которую берем в виде (6)

$$\psi(\rho) = A \exp(-\gamma \rho_z + k_{\perp} \rho_{\perp}), \quad (2)$$

где $k_{\perp}$ — компонента волнового вектора электрона вдоль поверхности, $A^2 = n$ — плотность свободных электронов в металле. Волновую функцию позитрония возьмем в виде гауссовой функции

$$\varphi(\mathbf{r}) = N \exp(-|\mathbf{R} - \mathbf{r}|^2 / \beta^2)$$

($\beta = 2a$, a — боровский радиус), что значительно упрощает расчет, но не меняет существенно результат. Дальнейшее упрощение связано со следующим физическим соображением. Обменный интеграл определяется степенью перекрывания электронных волновых функций (металла и позитрония), т. е. основной вклад в обменный интеграл дадут такие взаимные положения, при которых электроны позитрония и металла наиболее близки один к другому. Но в таких положениях позитрон находится далеко от электрона металла. Следовательно, при вычислении обменного интеграла можно пренебречь вторым слагаемым потенциала взаимодействия (1). Результат записывается в виде

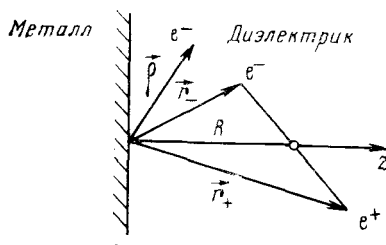


Рис. 1. Схема взаимодействия позитрония с электронами проводимости вблизи границы металл — диэлектрик

$$I(R) \simeq \int \frac{d^3 \mathbf{r} d^3 \rho \varphi^*(\rho) \psi^*(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) \psi(\rho)}{|\rho - \mathbf{r}|} \simeq \frac{e^2 \Delta N(T)}{4} \frac{\pi^3 \beta^4}{i k_{\perp}} \exp \left[-2\gamma R - \frac{\beta^2}{2} (\gamma^2 + k_{\perp}^2) \right] \left\{ 1 - \Phi \left[\frac{\beta}{\sqrt{2}} \left(\gamma - \frac{2R}{\beta^2} \right) \right] \right\} \left\{ \Phi \left(\frac{i\beta}{\sqrt{2}} k_{\perp} \right) - \Phi \left(-\frac{i\beta}{\sqrt{2}} k_{\perp} \right) \right\} \quad (3)$$

где $\Delta N(T)$ — плотность электронов вблизи поверхности Ферми, которые участвуют в интересующем нас обмене; $\Phi(x)$ — интеграл вероятности.

Перемещение электронов вдоль поверхности не влияет на обменный интеграл (3), поэтому положим $k_{\perp} = 0$. Для оценки примем $\gamma^{-1} = 2a$, тогда окончательно получим

$$I \simeq 2,4 \pi \Delta N(T) e^2 a^2 \exp(-x) \{1 - \Phi[0,7(1-x)]\}, \quad x = R/a. \quad (4)$$

Оценим вначале обменный интеграл для случая $T = 0$, когда

$$\Delta N(0) = \frac{3}{4} \frac{\Delta W}{\varepsilon_F} \simeq 10^{19} \text{ см}^{-3}; \quad (5)$$

В (5) учитывается только половина электронов с подходящим для конверсии направлением спина; ε_F — энергия Ферми металла. Среднее время ортопараконверсии в этом пределе имеет значение

$$\tau = \hbar / I = 10^{-11} \text{ сек. при } x = 1, \quad (6)$$

что существенно меньше времени жизни орто- и парасостояния позитрония. Следовательно, рассмотренный механизм должен приводить к эффективно-му тушению позитрония вблизи поверхности металла.

При повышении температуры для $T \gg \Delta W / k$ ($\gg 6^\circ \text{ K}$) число электронов, участвующих в обмене, будет возрастать пропорционально температуре. Действительно, при $T \neq 0$ распределение электронов вблизи поверхности

Ферми размывается на величину kT . В результате простых вычислений получаем

$$\Delta N(T) = \frac{mkT}{2\pi\hbar^2} \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{1/2} \approx 2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3} \quad (300^\circ \text{ K}) \quad (7)$$

и время обмена

$$\tau \approx \frac{\text{const}}{T} \frac{\exp x}{1 - \Phi[0,7(1-x)]}. \quad (8)$$

В действительности волновая функция позитрония в поре, граничащей с поверхностью металла, близка к волновой функции частицы с массой $2m$ (m — масса электрона) в сферической потенциальной яме ⁽³⁾, по несколько сдвинута в сторону металлической поверхности под действием сил изображения. При этом реальное значение обменного интеграла можно получить по формуле

$$J = \int_{-\infty}^{\infty} I(R) \Psi^2(R) \cdot 4\pi R^2 dR, \quad (9)$$

где $\Psi(R)$ — нормированная по всему пространству волновая функция позитрония в поре.

Оценки по формуле (8) показывают, что проявления конверсии позитрония на поверхности металла следует ожидать в порах диаметром до 10 Å, граничащих с металлической фазой.

Для $T \neq 0$ возможен и обратный обмен (${}^i\text{Ps} \rightleftharpoons {}^s\text{Ps}$), поэтому результаты аннигиляции, по данным временных спектров и кривых угловой корреляции аннигиляционного излучения, могут быть различными в зависимости от соотношения между τ , τ_i , τ_s ($\tau_i = 1/\lambda_i$, $\tau_s = 1/\lambda_s$ — собственные времена жизни орто- и паразитрония соответственно) и некоторыми другими параметрами. Рассмотрим этот вопрос подробнее.

Будем считать, что позитроний образуется с вероятностью P только на поверхности металлической фазы ⁽¹⁾ и со скоростью $\lambda_c = 1/\tau$ конвертирует (${}^i\text{Ps} \rightleftharpoons {}^s\text{Ps}$). Со скоростью λ_D образовавшийся позитроний может уйти из поры, граничащей с металлической фазой. После этого он может претерпеть уже только pickoff-аннигиляцию со скоростью λ_p .

Основой для анализа различных экспериментальных проявлений орто-параконверсии является система кинетических уравнений, учитывающая, наряду с конверсией, pickoff-аннигиляцию позитрония:

$$\begin{aligned} \frac{d^iP}{dt} &= 3\lambda_c {}^sP - (\lambda_c + \lambda_i + \lambda_p) {}^iP, \\ \frac{d^sP}{dt} &= -(3\lambda_c + \lambda_s + \lambda_p) {}^sP + \lambda_c {}^iP. \end{aligned} \quad (10)$$

Решение системы (10) имеет вид

$$\begin{aligned} {}^iP(t) &= A_i e^{-\lambda' t} + B_i e^{-\lambda'' t}, \\ {}^sP(t) &= A_s e^{-\lambda' t} + B_s e^{-\lambda'' t}, \end{aligned} \quad (11)$$

причем

$$\begin{aligned} \lambda' &= \alpha + (\alpha^2 - \delta^2)^{1/2}, \quad \lambda'' = \alpha - (\alpha^2 - \delta^2)^{1/2}, \quad \alpha = 2\lambda_c + \lambda_p + 1/2(\lambda_s + \lambda_i), \\ \delta^2 &= (\lambda_c + \lambda_i + \lambda_p)(3\lambda_c + \lambda_s + \lambda_p) - 3\lambda_c^2, \end{aligned}$$

а константы A_i , A_s , B_i , B_s выражаются через P , λ' , λ'' , λ_i , λ_s ⁽³⁾.

Возможны следующие основные варианты:

1) $\lambda_c \gg \lambda_s$, λ_D , λ_p . Весь позитроний конвертирует, и временной спектр состоит из двух короткоживущих компонент с близкими временами жизни: τ_i (свободные позитроны) и 4τ , ($0,5 \cdot 10^{-9}$ сек.). Вероятность образования

позитрония в этом случае легче определить по интенсивности узкой компоненты I_N кривых угловой корреляции аннигиляционных γ -квантов, причем $I_N = P$.

2) $\lambda_c \simeq \lambda_D \gg \lambda_s, \lambda_p$. В этом случае, как и в следующих двух, во временном спектре наблюдается долгоживущая компонента τ_2 . Ее интенсивность при данных условиях

$$I_2 = \frac{3}{4} P \frac{\lambda_D}{\lambda_D + \lambda_c} = 3I_N \frac{\lambda_D}{4\lambda_c + \lambda_D}. \quad (12)$$

Это та часть позитрония, которая успела выйти из поры и аннигилирует со скоростью $\lambda_p + \lambda_i$. Временной спектр содержит три времени жизни: τ_i , $4\tau_s$ и τ_2 .

3) $\lambda_c \simeq \lambda_D \simeq \lambda_p$. Здесь в дополнение к одной короткоживущей компоненте τ_i появляются две долгоживущих. Первая из них τ_2' , как и в случае 2), определяется pickoff-аннигиляцией в диэлектрике и имеет интенсивность

$$I_2' = 3I_N \frac{\lambda_D}{4\lambda_c + \lambda_D + \lambda_p}, \quad (13)$$

а время жизни τ_2'' второй — с интенсивностью

$$I_2'' = \frac{3}{4} - I_2' = 3I_N \frac{\lambda_c + \lambda_p}{4\lambda_c + \lambda_D + \lambda_p} \quad (14)$$

определяется pickoff-аннигиляцией и конверсией на стенках поры и вычисляется по формулам (11).

4) $\lambda_c \ll \lambda_D \simeq \lambda_p$. В этом случае весь образовавшийся триплетный позитроний аннигилирует в диэлектрике и дает долгоживущую компоненту τ_2 с интенсивностью $I_2 = 3I_N = 3/4 P$, т. е. соблюдается обычное соотношение между I_2 и I_N в соответствии со статвесами триплетного и синглетного позитрония.

Следует особо отметить, что в случаях 1) — 3) возможна ситуация, когда $I_2 < 3I_N$. Наблюдение этого факта на опыте в сочетании с увеличением I_2 в присутствии в пористом образце высокодисперсной металлической фазы (7) можно было бы рассматривать как доказательство образования позитрония на поверхности металла.

Институт химической физики
Академии наук СССР
Москва

Поступило
3 II 1975

Ташкентский государственный университет
им. В. И. Ленина

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, А. П. Питаевский, Релятивистская квантовая теория, ч. 1, М., 1968. ² A. Ore, Bergen Univ. Arbok Naturvit. rekke, № 12 (1949). ³ В. И. Гольданский, Физическая химия позитрона и позитрония, М., 1968. ⁴ W. Brandt, P. Klika, Phys. Rev. Lett., v. 30, 354 (1973). ⁵ Г. М. Баргенов, А. З. Варисов и др., ФТТ, т. 12, 3454 (1970). ⁶ Б. А. Трубников, Ю. Н. Явлинский, ЖЭТФ, т. 52, 1638 (1967). ⁷ В. И. Гольданский, Б. М. Левин и др., Письма в ЖЭТФ, т. 19, 448 (1974).