

01.00.00 Physico-mathematical sciences

01.00.00 Физико-математические науки

UDC 539.21:539.189.2

Positrons, Positronium, Positron and Positronium Complexes in Crystal. FEATURES Of Their Properties in Phonon Atmosphere

Eugene P. Prokopen

Russian Research Center "Kurchatov Institute", Pussia
25, B. Cheremushkinskaya street, Moscow, 117218

Abstract. The article, Basing on the example of ionic crystals shows that polarization of crystal framework by oppositely charged polarons (positronium atom (ps)) invokes the change of positronium binding energy and leads to the renormalization of electron and positron effective masses as well. Such interaction of electron and positronium atom of positron with optical phonons leads to additional repelling interaction, besides coulomb attractive. Furthermore, the existence of positronium atom with major and minor radius is possible in the atmosphere of crystal phonons.

Keywords: Positrons; Positronium; Positron and Positronium Complexes; Crystal.

Введение. К настоящему времени достигнут значительный прогресс в понимании процессов взаимодействия позитронов с кристаллами, особенно с ионными, полупроводниками и металлами [1-5]. В частности, использование диаграммной техники, использование диаграммной техники уже в первом порядке теории возмущений позволяет найти величину вероятности спонтанного и вынужденного испускания и поглощения фононов позитроном [4, 5]. Вычисления дают также значения собственной энергии и перенормированной массы позитронного полярона [3-5].

В данной работе на примере ионных кристаллов показано, что поляризация решетки кристалла разноименно заряженными поляронами (атом позитрония) вызывает не только изменение энергии связи позитрония, но и приводит к перенормировке эффективных масс электрона и позитрона. При этом взаимодействие электрона и позитрона атома позитрония с оптическими фононами приводит к дополнительному отталкивающему взаимодействию помимо кулоновского отталкивающего.

Прежде всего следует учесть факт, что диффузионная длина смещений позитрония в ионном кристалле составляет несколько сотен постоянной решетки. При этом поляризация решетки кристалла оказывает заметное влияние на свойства позитрония в ионных кристаллах [3]. Следует отметить также, что задача аннигиляции атома позитрония в ионных кристаллах очень похожа на аналогичную двухчастичную задачу – экситон в ионных кристаллах [6-10]. Здесь используется для решения задачи позитрония формализм Хакена [11].

**Исследование позитронных и позитрониевых состояний в кристалле
рамках формализма Хакена**

В предыдущей главе было установлено, что существуют стационарные состояния систем позитрон (атом Ps) - кристалл, так как характерные времена протекания позитронных процессов составляют 10^{-16} с, ионных процессов - 10^{-13} с, а самое короткое время жизни относительно аннигиляции равно примерно 10^{-10} с. Причем позитрон и атом Ps находятся в тепловом равновесии с решеткой кристалла, т.е. они термализованы. В общем случае при облучении позитронами идеального кристалла образуются позитронные состояния следующего типа: электроны, позитроны, дырки, экситоны, атом Ps и комплексы различной природы [12]. Теория таких состояний в полупроводниках и ионных кристаллах анализировалась в рамках известных расчетных моделей квантовой физики твердого тела [1, 2, 11]. Удалось установить как условие стабилизации этих состояний в кристалле (например, атом Ps в идеальной кристаллической решетке), так и условие их деструкции (например, распад атома Ps при экранировании кулоновского взаимодействия между

электроном и позитроном свободными носителями в полупроводниках). Теория этих состояний, однако, нуждается в более строгом обосновании и дальнейшем развитии. Наиболее эффективным методом описания свойств таких состояний является метод квантовополевого теории твердого тела [1, 2, 11]. Поэтому ниже в рамках этой теории дается описание свойств (эффективные массы, выражение для энергий и т.п.) позитронных состояний в идеальных кристаллах.

2. Общий подход

Изложим метод вторичного квантования для электронов и позитронов в твердом теле. Согласно [11], можем выписать выражение для одночастичных электронных и позитронных состояний в представлении вторичного квантования

$$\Phi = \sum_{\mu} C_{\mu} a_{\mu}^{+} \Phi_0 = \int f(\bar{x}) \psi^{+}(\bar{x}) d^3\bar{x} \Phi_0 . \tag{1}$$

Здесь операторы $\psi^{+}(\bar{x})$ и a^{+} являются операторами рождения и определены в [1,2,11]; C_{μ} - коэффициент разложения, причем $\sum_{\mu} C_{\mu} = 1$; Φ_0 - волновая функция вакуумного состояния; $f(\bar{x})$ - функция, удовлетворяющая общему одночастичному уравнению Шредингера

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + v(\bar{x}) \right] f(\bar{x}) = E f(\bar{x}) . \tag{2.}$$

Аналогично может быть рассмотрено общее состояние двух частиц с координатами \bar{x} и \bar{x}'

$$\Phi = \sum_{\mu_1 \mu_2} C_{\mu_1} C_{\mu_2} a_{\mu_1}^{+} a_{\mu_2}^{+} \Phi_0 . \tag{3}$$

Причем, как и выше,

$$\Phi = \iint f(\bar{x}, \bar{x}') \psi^{+}(\bar{x}) \psi^{+}(\bar{x}') d^3\bar{x} d^3\bar{x}' \Phi_0 . \tag{4}$$

Выбирая стандартный гамильтониан, получаем уравнение Шредингера для двух частиц

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 + v(\bar{x}_1) + v(\bar{x}_2) \right] f(\bar{x}_1 \bar{x}') = E f(\bar{x}_1, \bar{x}') . \tag{5}$$

Эти результаты могут быть обобщены на случай многих частиц: n электронов и m позитронов.

3. Проблема многих электронов и позитронов в твердом теле

Проблема многих электронов и позитронов в рамках метода вторичного квантования может быть сформирована на основании следующей картины: электроны и позитроны движутся в строго периодическом поле решетки, ионы которой имеют бесконечно большие массы и находятся в состоянии покоя. Электроны внутренних атомных оболочек учитываются в целом тем, что они вместе с положительными атомными ядрами создают эффективный периодический решеточный потенциал V . Естественно, что позитроны в основном движутся по периферии атомов кристалла в силу электростатического отталкивания ядрами. Оператор Гамильтона для электронов и позитронов состоит из четырех составляющих: кинетической энергии электронов (позитронов), кулоновской энергии взаимодействия электронов (позитронов) с ядрами, потенциальной энергии взаимодействия электронов (позитронов) друг с другом и кулоновской энергии взаимодействия электронов с позитронами. Согласно [1,2,11], можно записать уравнение Шредингера для электронной и позитронной подсистем через операторы поля $\psi^{+}(\bar{x})$, $\psi(\bar{x})$, $\chi^{+}(\bar{x})$, $\chi(\bar{x})$, удовлетворяющие ферми-перестановочным соотношениям [11]. Эти операторы разлагаются по собственным функциям $\phi_{k_{-}}(x)$, $\phi_{k_{-}}^{*}(x)$, $\phi_{k_{+}}(x)$ и $\phi_{k_{+}}^{*}(x)$ следующим образом:

$$\psi(x) = \sum_{k_{-}} a_{k_{-}} \phi_{k_{-}}(x) ; \psi^{+}(x) = \sum_{k_{-}} a_{k_{-}}^{+} \phi_{k_{-}}^{*}(x) ; \tag{6}$$

$$\chi(x) = \sum_{k_{+}} a_{k_{+}} \phi_{k_{+}}(x) ; \chi^{+}(x) = \sum_{k_{+}} a_{k_{+}}^{+} \phi_{k_{+}}^{*}(x) . \tag{7}$$

Отметим, что операторы поля $a_{k_{\pm}}^+$ и $a_{k_{\pm}}$ также удовлетворяют ферми-перестановочным соотношениям. Считаем, как обычно, что собственные функции $\varphi_{k_{\pm}}$, $\varphi_{k_{\pm}}^*$ образует полный набор ортонормированных функций, но при этом их следует минимизировать так, чтобы они являлись решениями уравнения Шредингера. Для этого используется метод Хартри - Фока [130, 190, 196].

Создадим некоторое состояние Φ электронов и позитронов кристалла. Для этого расположим электроны и позитроны один за другим по состояниям $k_{-1}, k_{-2}, \dots, k_{-n}, k_{+1}, k_{+2}, \dots, k_{+m}$. Таким образом,

$$\Phi = a_{+1}^+ a_{+2}^+ \dots a_{+m}^+; a_{-1}^+, a_{-2}^+, \dots, a_{-n}^+ \Phi_0. \quad (8)$$

Используем волновую функцию (2.8) для построения среднего значения оператора Гамильтона

$$H = H_- + H_+ \quad (9)$$

с дополнительным условием, что функция состояния нормирована.

Далее потребуем условия

$$\langle \Phi / H / \Phi \rangle = \min \quad (10)$$

и вычислим его как функционал φ_{k_-} и φ_{k_+} с дополнительным условием

$$\langle \Phi / \Phi \rangle = 1. \quad (11)$$

Затем определим φ_{k_-} и φ_{k_+} с помощью варьирования, что позволит сразу же получить уравнение Хартри - Фока для одноэлектронных и однопозитронных волновых функций кристалла

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{эфф}}^-(x) \right] \varphi_{k_-}(x) = E_- \varphi_{k_-}(x); \quad (12)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{эфф}}^+(x) \right] \varphi_{k_+}(x) = E_+ \varphi_{k_+}(x). \quad (13)$$

Здесь $V_{\text{эфф}}^{\pm}(x)$ - эффективные хартри-фоковские потенциалы, включающие все виды взаимодействий, в общем случае являются периодическими с периодом решетки кристалла.

Ранее никак не уточнялось, насколько заполнены получившиеся электронные и позитронные зоны. Приведенный формализм может быть применен для случая полностью заполненной валентной зоны и соседних электронных и позитронных зон проводимости с одним электроном и одним позитроном. Имеем для функции избыточного электрона

$$\Phi_- = a_{k_-L_-}^+ \langle a_{k_+L_+}^+ (a_{k_-1v}^+ a_{k_-2v}^+ \dots a_{k_-nv}^+) \rangle \Phi \approx a_{k_-L_-}^+ \Phi_v^-, \quad (14)$$

а для функции избыточного позитрона

$$\Phi_+ \approx a_{k_+L_+}^+ \Phi_v^+, \quad (\Phi_v^+ \approx \Phi_0), \quad (15)$$

где L_-, L_+, v - индексы, относящиеся к электронным и позитронным зонам проводимости и валентной зоне соответственно. Принимаем, что

$$\Phi = \Phi_- \Phi_+ \approx a_{k_-L_-}^+ a_{k_+L_+}^+ \Phi_v^- \Phi_v^+ = a_{k_-L_-}^+ a_{k_+L_+}^+ \Phi_v. \quad (16)$$

Далее, согласно [190, 196], легко рассмотреть применение теории Блоха к системе электронов и позитронов в кристаллической решетке и дать обоснование МЭМ, позволяющие записать полные энергии

$$E_{k_{\pm}j} = E_{0,j} \pm \hbar^2 k_{\pm}^2 / 2m_{\pm} +$$

+ (члены более высокого порядка, которыми пренебрегаем). (17)

Здесь m_{\pm} - эффективные массы электрона или позитрона. С учетом сдвига по энергии E_0 уравнение Шредингера в блоховском потенциале $W_{\pm}(x)$ записывается в виде

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_{\pm}} \nabla^2 + W_{\pm}(x) \right] \psi_{\pm}(x) = E_{\pm} \psi_{\pm}(x). \quad (18)$$

Решение уравнения (18) для позитрона удобнее всего анализировать в приближении Ванье [1, 2, 11], позволяющем описывать локализацию позитрона в окрестности точки $\bar{1}$ на протяжении примерно постоянной решетки. Важным свойством функций Ванье является их ортогональность, т.е. функции Ванье, локализованные в точках l и l' или принадлежащие различным значениям μ и μ' , взаимно ортогональны

$$\iint \omega_{\mu}^*(\bar{x} - \bar{1}) \omega_{\mu}(\bar{x} - \bar{1}') d^3\bar{x} = \delta_{\mu\mu'} \delta_{ll'} \quad (19)$$

4. Электроны, позитроны и дырки в идеальном полупроводниковом кристалле

Формализм вторичного квантования позволяет определить электрон, позитрон и дырку как квазичастицы с эффективными массами m_-, m_+, m_v соответственно. Для этого рассмотрим взаимодействие между электронами, дырками и позитронами на примере полупроводникового кристалла. Исследуем вопрос о форме эффективных взаимодействий при наличии удаленных из валентной зоны в зону проводимости некоторых электронов (т.е. создание в валентной зоне нескольких дырок). Причем не обязательно число дырок равно числу электронов в зоне проводимости. Их число может быть значительно больше в результате ионизации мелких примесных центров даже при комнатной температуре. Позитроны же вводятся в кристаллы, например, из β^+ -радиоактивного источника (Na^{22}, Cu^{64} и т.д.) и образуют позитронную зону проводимости. Система такого типа описывается уравнением Шредингера $H\Phi = E\Phi$. Оператор Гамильтона H , как и ранее, записываем через операторы поля $\psi_{\pm}^{\pm}(x)$ и $\psi_{\pm}(x)$, которые для рассмотрения состояний электронов в валентной зоне v , электронов и позитронов в зоне проводимости разлагаются по собственным функциям валентной зоны $\phi_{k-,v}$ и зоны проводимости $\phi_{k_{\pm},L_{\pm}}$.

Вводим операторы рождения $a_{k_{-},v}^+ = d_{k_-}$; $a_{k_{-}L_{-}}, a_{k_{+}L_{+}}$ и уничтожения $a_{k_{-},v} = d_{k_-}$; $a_{k_{-}L_{-}}, a_{k_{+}L_{+}}$ дырок, электронов и позитронов соответственно. Из соотношений (2.14), (2.15) и введенных операторов рождения и уничтожения квазичастиц следует, что дырка в валентной зоне не полностью тождественна позитрону как реальной частице. Согласно проведенным расчетам [12,13], оператор Гамильтона

$$H = H_0^- + H_0^+ + H_{v3}^- + H_{v3}^{\pm}, \quad (20)$$

где H_0^- и H_0^+ - операторы, описывающие взаимодействие лептонов в зоне проводимости и взаимодействие лептонов зоны проводимости и валентной зоны. В свою очередь

$$H_{v3}^- = H_{L_{-}L_{-}} + H_{L_{-}L_{+}} + H_{L_{-}v} + H_{vv}; \quad (21)$$

$$H_{v3}^{\pm} = H_{L_{-}L_{+}} H_{L_{+}v}. \quad (22)$$

Здесь $H_{L_{-}L_{-}}$ - взаимодействие электронов в зоне проводимости; $H_{L_{-}L_{+}}$ - взаимодействие электронов с позитронами; H_{vv} - взаимодействие дырок в валентной зоне; $H_{L_{-}v}$ - взаимодействие дырок валентной зоны и позитронов в позитронной зоне проводимости.

Таким образом, оператор Гамильтона для электронов, дырок и позитронов в кристалле может быть выбран в виде

$$H = H_0 + H_{v3} = H_{эл} + H_{д} + H_{поз} + H_{эл-эл} + H_{эл-д} + H_{поз-д} + H_{эл-поз} + H_{д-д} + W_{зап}, \quad (23)$$

где $W_{зап}$ - энергия валентной зоны.

В работах [1, 2, 11] были получены выражения для H_{ij} , входящие в гамильтониан (23), через операторы рождения и уничтожения электронов, дырок и позитрона и матричные элементы энергий взаимодействия между соответствующими зонами. Выражения для энергий основного состояния электронов, позитрона и дырок для случая их нахождения вблизи краев зон записываются в виде

$$E_{k_{\pm}L_{\pm}} = E_{0,L_{\pm}} \pm h^2 k_{\pm}^2 / 2m_{L_{\pm}}; \quad (24)$$

$$E_{k_{-}v} = E_{0,v} - h^2 k^2 / 2m_v. \quad (25)$$

Сравнение (2.24) и (2.25) четко выявляет различие между позитроном и дыркой.

5. Проблема экситона, атома Ps и комплексов Уилера различной природы (позитрон-экситонные комплексы и ионы атома Ps)

С учетом приведенной выше многочастичной модели рассмотрим проблему экситонов, атома Ps и позитрон-экситонных комплексов [14,15]. Задача для общего случая позитрон-экситонного комплекса заключается опять-таки в решении уравнения Шредингера $H\Phi = E\Phi$, где гамильтониан H описывается выражением (23).

Рассмотрим уравнение (23) для случая одного электрона, одного позитрона и одной дырки. Волновые функции электронов в состоянии k_{-1} , позитрона в состоянии k_{+1} и дырки в состоянии k_{-2} можно получить из состояния, описывающего полностью заполненную валентную зону, последовательным действием операторов рождения $a_{k_{-1}}^+, a_{k_{+1}}^+$ и $d_{k_{-2}}^+$ на функцию валентной зоны

$$a_{k_{-1}}^+ a_{k_{+1}}^+ d_{k_{-2}}^+ \Phi_v. \tag{26}$$

Из выражения (26) следует, что электрон, дырка и позитрон, пролетая друг относительно друга, испытывают взаимное рассеяние, в результате чего попадают в различные конечные состояния $k'_{-1}, k'_{-2}, k'_{+1}$. Поэтому следует образовать функцию по всем состояниям k_{-1}, k_{-2}, k_{+1} электрона, позитрона и дырки. Исходя из этого состояния, волновая функция позитрон-экситонного комплекса имеет вид:

$$\Phi = \sum_{k'_{-1}, k'_{-2}, k'_+} C_{k_{-1}, k_{-2}, k_+} a_{k_{-1}}^+ d_{k_{-2}}^+ a_{k_{+1}}^+ \Phi_v. \tag{27}$$

Гамильтониан трехчастичной системы с учетом сдвига по энергии с тем, чтобы опустить $W_{зап}$ [1,2,11], состоит из выражения для кинетической энергии электрона, позитрона и дырки и взаимодействия между ними

$$H_{общ} = H_{кин} + H_{эл-д} + H_{эл-поз} + H_{поз-д}. \tag{28}$$

Действуя оператором $H_{общ}$ на функцию Φ и выполняя соответствующие преобразования и упрощения, получаем уравнение Шредингера для позитрон-экситонного комплекса

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_{L-}} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_{L+}} \nabla_2^2 - \frac{\hbar^2}{2m_v} \nabla_3^2 - \frac{e^2}{\sum |x_1 - x_2|} - \frac{e^2}{\sum |x_1 - x_3|} + \frac{e^2}{\sum |x_2 - x_3|} \right) \times \psi(x_1, x_2, x_3) = E\psi(x_1, x_2, x_3). \tag{29}$$

Позитронно-экситонный комплекс (своеобразное соединение Уилера) является аналогом классических полиэлектронных систем Уилера $e^-e^+e^-$ или $e^+e^-e^+$ (ионы позитрония) [16, 17]. Он открыт сравнительно недавно Миллсом [18] в результате изящных экспериментов. Сродство к позитрону (электрону) атома Ps для таких комплексов составляет величину не менее 0,1 эВ, а время жизни относительно аннигиляции, согласно расчетам Ферранте [17], ровно $\tau_{2\gamma} = 5,02 \cdot 10^{-10}$ с. Концепция позитрон-экситонного комплекса [19, 20] неоднократно использовалась для объяснения природы позитронной аннигиляции в ионных кристаллах и полупроводниках. Отметим, что из записанного выше трехчастичного уравнения (28) позитрон-экситонного комплекса легко получить уравнение для атома Ps большого радиуса и экситона Ванье в кристалле.

Ранее постулировалось утверждение о том, что расстояние между электроном, позитроном и дыркой велико, следовательно, вполне разумным является разложение операторов поля $\psi^+(x)$ и $\psi(x)$ по блоховским функциям. Можно, однако, рассмотреть и противоположный случай, когда электрон и позитрон находятся на одном и том же атоме - атом Ps малого радиуса или позитроний Френкеля [1, 2]. При этом разложение лучше всего проводить по функциям Ванье. Волновая функция Ванье позитрония Френкеля записывается в виде

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_1 \exp(ikl) a_{1,L+}^+ a_{1,L-}^+ \Phi_g. \tag{30}$$

Здесь $V_1^+ = a_{1,L_+}^+ a_{1,L_-}^+$ - оператор рождения локализованного в точке $\bar{1}$ атома Ps. Разумеется, оператор его уничтожения есть $V_1 = a_{1,L_+} a_{1,L_-}$. Гамильтониан позитрония Френкеля при помощи этих операторов запишется в виде

$$H = \sum_1 V_1^+ V_1 \bar{E}_{0,общ} + \sum_{1,1'} V_1^+ V_1 W(1-1'). \quad (31)$$

Действуя этим оператором на волновую функцию Φ и проводя соответствующие упрощения [1,2], получаем выражение для энергии позитрония Френкеля

$$E(\bar{K}) = E(0) + \hbar^2 K^2 / 2m_p^*, \quad (32)$$

где \bar{K} - волновой вектор позитрония; $m_p^* = m_- + m_+$. Выражение (31) представляет собой закон дисперсии для френкелевской позитрониевой зоны в кристалле [1, 2].

6. Взаимодействие позитронов и атома Ps с фононами кристалла в рамках методов вторичного квантования и функций Грина

По методу вторичного квантования в [1, 2, 11] было учтено взаимодействие позитронов и атома Ps с фононами кристалла. Для этого в рамках нестационарной теории возмущений в представлении взаимодействия рассмотрены процессы спонтанного и вынужденного испускания и поглощения фононов позитроном в кристалле.

Квантованный гамильтониан Фрелиха системы записывается, как обычно [1, 2, 11], в виде суммы $H = H_0 + H_{вз}$, где H_0 - гамильтониан невозмущенной задачи; $H_{вз}$ рассматривается как малое возмущение.

Диаграммная техника первого порядка теории возмущений позволяет вычислить вероятность спонтанного и вынужденного испускания и поглощения фононов позитроном. Расчеты же с использованием диаграммной техники второго порядка теории возмущений позволяют найти значения собственной энергии и перенормированной массы позитрона в кристалле: $m_+^{**} = m_+^*(1 + \delta)$, где δ - сдвиг по энергии в единицах массы; m_+^* - зонная эффективная масса.

Использование теоремы о точной форме решения для взаимодействия позитрона с колебаниями решетки стационарного уравнения Шредингера $H\Phi = E\Phi$ в полярных кристаллах позволяет получить выражение для энергии позитронного полярона Фрелиха [1, 2, 11]:

$$E_k = -\hbar\omega\alpha + \hbar^2 k^2 / 2m_+^* (1 - \frac{\alpha}{6}) + O(k^4). \quad (33)$$

Откуда следует, что собственная энергия E_0 и перенормированная масса m_+^{**} равны соответственно

$$E_0 = -\alpha\hbar\omega; \quad (34)$$

$$m_+^{**} \approx m_+^* (1 + \frac{\alpha}{6}), \quad (35)$$

где α - константа связи.

Для расчетов позитронных процессов в кристаллах был использован метод функций Грина [1]. Показано, что функция Грина позитрона имеет стандартный вид

$$G_{\bar{k}}(\varepsilon) = C_{\bar{k}}(\varepsilon - \varepsilon_k + i\gamma)^{-1}, \quad (36)$$

и является функцией \bar{k} и ε (здесь ε имеет размерность частоты).

Рассмотрим функцию (36) для фиксированного \bar{k} позитрона, но переменного ε . Так как знаменатель в $G_{\bar{k}}(\varepsilon)$ - комплексная величина, то эта функция отображается на комплексной ε -плоскости. Эта функция имеет на комплексной плоскости один полюс, действительная координата которого равна ε , а мнимая - обратному значению времени жизни. Отсюда приходим к основному понятию: полюс $G_{\bar{k}}(\varepsilon)$ определяет энергию и время жизни позитрона (как квазичастицы) или его взаимодействие с кристаллом (окружением).

Чрезвычайно интересно применение метода функций Грина к проблеме многих электронов и позитронов в кристалле, развитое в [1].

7. Теория атома Ps в полярных кристаллах. Учет взаимодействия с фононами

Ниже показано, что поляризация решетки ионного (полярного) кристалла, не только вызывает изменение собственной энергии и перенормировку масс электрона и позитрона, но и создает дополнительное отталкивающее взаимодействие между электроном и позитроном [1].

Исходный гамильтониан атома Ps, учитывающий взаимодействие электрона и позитрона с колебаниями решетки, записывается в виде

$$H = H_{эл} + H_{поз} + H_{ph} + H_{вз1} + H_{вз2} + H_{эл-поз}. \quad (37)$$

Здесь $H_{эл}$ и $H_{поз}$ - операторы Гамильтона свободных электрона и позитрона,

$$H_{эл} = -\frac{\hbar^2}{2m_-^*} \nabla_1^2; \quad H_{поз} = -\frac{\hbar^2}{2m_+^*} \nabla_2^2, \quad (38)$$

причем в общем случае $m_-^* \neq m_+^*$.

Оператор H_{ph} описывает газ фононов (колебания решетки)

$$H_{ph} = \sum_{\vec{w}} \hbar \omega b_{\vec{w}}^+ b_{\vec{w}}, \quad (39)$$

где $b_{\vec{w}}^+$ и $b_{\vec{w}}$ - операторы испускания (рождения) и поглощения фононов соответственно; ω - частота продольных колебаний; \vec{w} - волновой вектор фонона.

Члены, отвечающие взаимодействию электрона и позитрона с фононами, имеют вид

$$H_{взi} = \hbar \sum_{\vec{w}} \left(g_{\vec{w}} e^{i\vec{w}x_i} + g_{\vec{w}}^* e^{-i\vec{w}x_i} \right), \quad i = 1, 2. \quad (40)$$

Гамильтониан

$$H_{эл-поз} = -\frac{e^2}{\epsilon_{\infty} |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}, \quad (41)$$

где ϵ_{∞} - оптическая диэлектрическая проницаемость.

Задача эффективного взаимодействия электрона с позитроном (т.е. поляроном) в изложенных выше приближениях была решена методом Хакена [3-5, 11]. В частности, для полной энергии имеем

$$W_{п} = -\frac{e^2}{\epsilon_{\infty} |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} + \left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \frac{e^2}{r} \left[1 - \frac{1}{2} \left(e^{-u_1 r} + e^{-u_2 r} \right) \right]. \quad (42)$$

Здесь ϵ_0 - статическая диэлектрическая проницаемость; $r = |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|$;

$$u_1 = \left(2m_-^* \omega / \hbar \right)^{\frac{1}{2}}; \quad u_2 = \left(2m_+^* \omega / \hbar \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (43)$$

Из анализа выражения для полной энергии (42) следует, что для атома Ps, так же как и для экситонов, в экспериментах можно установить существование перехода от кулоновского взаимодействия с ϵ_{∞} при малых радиусах атома Ps к взаимодействию с ϵ_0 при больших радиусах атома Ps.

Совершим предельный переход, т.е. полагая $r \rightarrow \infty$, получаем выражение для полной энергии позитрония большого радиуса

$$W_f = -e^2 / \epsilon_0 r \quad (44)$$

И соответственно для кинетической энергии электрона и позитрона

$$E_{k_-} = -\hbar \omega \alpha_- + \frac{\hbar^2 k_-^2}{2m_-^{**}}, \quad (45)$$

$$E_{\vec{k}_+} = -\hbar\omega\alpha_+ + \frac{\hbar^2 k_+^2}{2m_+^{**}}, \quad (46)$$

т.е. у электрона и позитрона, согласно Хакену [11], появляются перенормированные поляронные массы m_-^{**} и m_+^{**} и соответственно собственные энергии $-\hbar\omega\alpha_-$ и $-\hbar\omega\alpha_+$, при этом (см. также (35)) $m_{\pm}^{**} \approx m_{\pm}^* (1 + \frac{\alpha_{\pm}}{6})$.

Напротив, при $r \rightarrow 0$ главный вклад в W_f дают члены

$$W_f = \hbar\omega\alpha_- + \hbar\omega\alpha_+ - \frac{e^2}{\varepsilon_{\infty} r} \quad (47)$$

Сравнивая выражения (44), (45), (46) и (47), видим, что для позитрония, так же как и для экситона по Хакену [11], можно установить существование перехода от чисто кулоновского взаимодействия с ε_{∞} при малых радиусах позитрония к взаимодействию с ε_0 при больших расстояниях между электроном и позитроном. В последнем случае можно говорить о существовании квазипозитрония большого радиуса и о наличии перехода в некоторых случаях от квазипозитрония к обычному позитронию. Пользуясь найденными значениями перенормированных масс, путем простых действий можно легко найти характеристики позитрония как большого, так и малого радиуса соответственно. В этом направлении следует провести тщательные экспериментальные исследования.

Примечания:

1. Прокопьев Е.П. Исследования позитронных процессов в кристаллах. М., 1982. 60 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-3556. МРС ВИМИ "Техника, технология, экономика". 1983. Сер."ЭР".
2. Прокопьев Е.П. Позитроны и позитроний в кристаллах. М., 1982. 138 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-3475. МРС ВИМИ "Техника, технология, экономика". № 8. 1983. Сер."ЭР".
3. Прокопьев Е.П., Урбанович С.И. Позитроний в газе фононов // Известия АН БССР. Серия физико-математических наук. 1987. №5. С.92-94.
4. Светлов-Прокопьев Е.П. Динамика позитронов в идеальных кристаллах. 1. Нестационарная теория возмущений (первый порядок). Подвижность и дрейф позитронов в электрическом поле. Труды XVII Международного совещания "Радиационная физика твердого тела". (Севастополь, 9-14 июля 2007 г.), под редакцией заслуженного деятеля науки РФ, д.ф.-м.н., проф. Бондаренко Г.Г. М.: ГНУ «НИИ ПМТ», 2007. С. 625-636. <http://www.niipmt.ru/index.php?p=6>
5. Светлов-Прокопьев Е.П. Динамика позитронов в идеальных кристаллах. 2. Нестационарная теория возмущений второго порядка и более высших порядков. Собственная энергия и перенормировка массы позитрона. Труды XVII Международного совещания "Радиационная физика твердого тела". (Севастополь, 9-14 июля 2007 г.), под редакцией заслуженного деятеля науки РФ, д.ф.-м.н., проф. Бондаренко Г.Г. М.: ГНУ «НИИ ПМТ», 2007 г., С. 637-644. <http://www.niipmt.ru/index.php?p=6>
6. Френкель Я.И. Избранные труды. Т.2. М.: Наука, 1958.
7. Нокс Р. Теория экситонов. М.: Мир, 1966.
8. Агранович В.М. Теория экситонов. М.: Наука, 1968.
9. Агранович В.М., Гинзбург В.Л. Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов. М.: Наука, 1979.
10. Светлов-Прокопьев Е.П. Исследование свойств атома позитрония в кристаллах. Труды XVIII Международного совещания "Радиационная физика твердого тела". (Севастополь, 7-12 июля 2008 г.), под редакцией заслуженного деятеля науки РФ, д.ф.-м.н., проф. Бондаренко Г.Г. М.: ГНУ «НИИ ПМТ», 2008 г., <http://www.niipmt.ru/index.php?p=6>

11. Хакен Х. Квантовая теория твердого тела. М.: Наука, 1982. 262 с.
12. Прокопьев Е.П. Новые представления об аннигиляции позитронов и позитронных состояниях в полупроводниках // Химия высоких энергий. 1994. Т. 28, № 5. С. 426–428.
13. Прокопьев Е.П. Введение в теорию позитронных процессов в полупроводниках и ионных кристаллах. М., 1979. 384 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-2837. МРС ВИМИ "Техника, технология, экономика". № 27. 1980. Сер. "ЭР".
14. Прокопьев Е.П. Комплексы Уилера в полупроводниках. М., 1979. 12 с. – Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-2757. МРС ВИМИ "Техника, технология, экономика". № 28. 1979. Сер. "ЭР".
15. Арефьев К.П., Прокопьев Е.П., Нурмагамбетов С.Б. Комплексы Уилера в кристаллах // Известия вузов. Физика. 1981. № 4.
16. Wheeler J.A. Polyelectron systems // Ann. N.Y. Acad. Sci. 1946. Vol. 48, № 1. P. 219–226.
17. Ferrante G. Annihilation from Positronium Negative Ion $e^-e^+e^-$ // Phys. Rev. 1968. Vol. 170, № 1. P. 76–80.
18. Mills A.P., Jr. // Phys. Rev. Letters. 1981. Vol. 46, № 11. P. 717.
19. Прокопьев Е.П. Аннигиляция позитронов и комплексы Уилера в полупроводниках // Химия высоких энергий. 1995. Т. 29, № 5. С. 394–396.
20. Арефьев К.П., Воробьев С.А., Прокопьев Е.П. Позитроника в радиационном материаловедении ионных структур и полупроводников. М.: Энергоатомиздат, 1983. 88 с.

УДК 539.21:539.189.2

Позитроны, позитроний, позитронные и позитрониевые комплексы в кристалле. Особенности их свойств в атмосфере фононов

Евгений Петрович Прокопьев

Курчатовский институт, Россия
117218, Москва, ул. Б.Черемушкинская, 25

Аннотация. В данной работе на примере ионных кристаллов показано, что поляризация решетки кристалла разноименно заряженными поляронами (атом позитрония (Ps)) вызывает не только изменение энергии связи позитрония, но и приводит к перенормировке эффективных масс электрона и позитрона. Это взаимодействие электрона и позитрона атома позитрония с оптическими фононами приводит к дополнительному отталкивающему взаимодействию помимо кулоновского притягивающего. При этом в атмосфере фононов кристалла возможно существование атома позитрония с большими и малыми радиусами.

Ключевые слова: Позитроны; позитроний; позитронные и позитрониевые комплексы; кристалл.