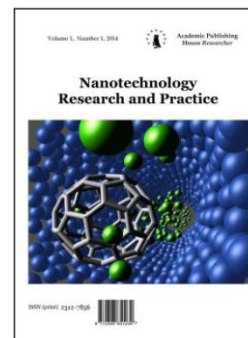


Copyright © 2014 by Academic Publishing House *Researcher*

Published in the Russian Federation
Nanotechnology Research and Practice
Has been issued since 2014.
ISSN: 2312-7856
Vol. 3, No. 3, pp. 159-176, 2014

DOI: 10.13187/ejnr.2014.3.159
www.ejournal13.com



UDC 735.29

The Atom of Positronium in the Ionic Crystal

Evgenii P. Prokop'ev

Kurchatov Institute, Institute of Theoretical and Experimental Physics, Russian Federation
E-mail: epprokopiev@mail.ru

Abstract

The review article considers the properties of the atom of positronium (Ps) of small radius in the excitonic presentation. The key role of this problem is the use of many-electron approach. The use of excitonic presentation of Vanier system $Ps + \text{crystal}$ is the best model Ps of the small radius. The natural justification of the approach of the 'heavy' Ps small radius and the concerned errors of the annihilation process is possible in the framework of this model. The considered transport mechanisms enable to obtain the number of new valuable results. The most important is that the values can capture Ps the small radius, which is comparable to the experimental values of the annihilation rate. Significantly, crystals with high concentration of defects Ps can annihilate exactly from localized states.

Keywords: atom of positronium; ionic crystal; review.

Введение

Эксперименты показали, что атом позитрония (Ps) в ионных кристаллах вносит заметный вклад в процесс аннигиляции позитронов, причем Ps малого и большого радиусов. В данной работе обзорного характера исследованы свойства Ps малого и большого радиусов в ионных кристаллах в рамках различных квантовомеханических моделей (например, моделей Френкеля, Ванье-Мотта и многих других [1-26]), позволяющие правильным образом объяснять аномалии аннигиляции позитронов в различных веществах. Экспериментальные исследования также показали, что свойства Ps в очень большой степени зависят от свойств исследуемых объектов (например, идеальные и дефектные кристаллы). Вначале рассмотрим основные свойства Ps в идеальных ионных кристаллах.

Атом позитрония в идеальных ионных кристаллах

Впервые спектр связанной системы электрон-позитрон по методу Бора рассмотрел Мохоровичич [27] в связи с возможностью наблюдения оптического излучения этой системы в спектрах звезд. Этот простейший метастабильный водородоподобный атом получил в дальнейшем наименование «позитроний» [28]. Его химическим символом, ставшим общепринятым, является Ps - символ [29]. Энергетический спектр и аннигиляционные свойства Ps явились объектом обстоятельных и глубоких теоретических

исследований [30-68]. Ps был впервые открыт и изучен Дейчем [69] в газах с помощью изящных и прецизионных экспериментов.

Вначале рассмотрим свойства Ps в идеальных (бездефектных) ионных кристаллах. Проанализируем и рассмотрим для этого различные модели Ps .

Атом позитрония в кристалле. Метод теории возмущений

Гамильтониан системы двух частиц – электрона и позитрона – в кристалле без учета поляризационного взаимодействия имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}(\nabla_-^2 + \nabla_+^2) - \frac{e^3}{|\bar{r}_- - \bar{r}_+|} + eV(\bar{r}_+) - eV(\bar{r}_-), \quad (1)$$

где $V(\bar{r})$ - потенциал кристаллического поля. Вводя координаты центра инерции $\bar{R} = (\bar{r}_- + \bar{r}_+)/2$ и относительные координаты $\bar{r} = \bar{r}_- - \bar{r}_+$, приведем гамильтониан (1) к виду

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{4m_0}\nabla_{\bar{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{m_0}\nabla_{\bar{r}}^2 - \frac{e^3}{r} + eV(\bar{R} - \frac{\bar{r}}{2}) - eV(\bar{R} + \frac{\bar{r}}{2}), \quad (2)$$

Нимтэн и Верралл [70] получили решение уравнения Шредингера с гамильтонианом (2) для случая кристалла LiH методом теории возмущений. За возмущение принималась часть гамильтониана (2)

$$H' = eV(\bar{R} - \frac{\bar{r}}{2}) - eV(\bar{R} + \frac{\bar{r}}{2}), \quad (3)$$

Невозмущенная волновая функция записывалась в обычном виде

$$\Psi(\bar{R}, \bar{r}) = \Psi_{\dot{k},nlm} = \exp(i\bar{K}\bar{R})\Psi_{\dot{k},nlm}(\bar{r}), \quad (4)$$

где $\Psi_{nlm}(\bar{r})$ - волновые функции, описывающие внутреннее относительное движение nlm состояния атома Ps . Поправка первого порядка к энергии основного состояния $(\Psi_{0,100} | H' | \Psi_{0,100})$ равна нулю ввиду нечетности оператора H' относительно координаты \bar{r} : $H'(\bar{r}) = -H'(-\bar{r})$, т.е. относительно замены электрона на позитрон и наоборот. По той же причине равны нулю и все поправки более высокого порядка нечетной степени.

Во втором порядке теории возмущения энергия основного состояния Ps в кристалле LiH равна -13,43 эВ, т.е. сродство кристалла LiH к атому Ps положительно и довольно велико: $Q_{Ps} = 6,63$ эВ.

Волновая функция Ps в основном состоянии в кристалле содержит примесь возбужденных состояний с $n > 1$ и $l \neq 0$. Поэтому скорость спонтанной аннигиляции Ps в кристалле выше, чем в вакууме. Однако, время жизни Ps в кристалле LiH в 1^1S_0 - состоянии относительно спонтанной аннигиляции всего на 16 % оказалось выше, чем для 1^1S_0 - позитрония в вакууме. Следовательно, объяснить наблюдаемое на опыте значение долгого времени жизни позитронов τ_2 аннигиляцией 1^1S_0 - позитрония невозможно. Кроме того, увеличение собственного времени жизни Ps несовместимо с повышенной

вероятностью 3γ - аннигиляции и аномально слабым магнитным тушением Ps , характерным для щелочно-галогидных кристаллов (ЩГК).

Для того, чтобы проследить зависимость сродства позитрония к кристаллу в зависимости от межатомного расстояния и эффективного заряда ионов удобно взять потенциал кристаллического поля в приближении точечных ионов [71, 72]. В этом приближении поправка второго порядка к энергии основного состояния атома Ps за счет возмущающего действия кристаллического поля для кристаллов с решеткой типа $NaCl$ равна

$$E_1^{(2)} \approx 2 \sum_{\bar{g}} |C_{\bar{g}}|^2 \left[1 - \left(\frac{1}{1 + a_0^2 K^2} \right) \right]^2 \cdot \left(E_1 - \frac{\hbar^2 K^2}{4m_0} \right) \quad (5)$$

Здесь $C_{\bar{g}}$ - коэффициенты Фурье потенциала кристаллического поля

$$C_{\bar{g}} = \frac{2\pi\eta e^2}{d^3} \left\{ \frac{1}{K^2} [1 - (-1)^{n_1+n_2+n_3}] \right\}, \quad (6)$$

где $\bar{g} = n_1\bar{b}_1 + n_2\bar{b}_2 + n_3\bar{b}_3$, а \bar{b}_i - базисные векторы обратной решетки; ηe - эффективный заряд ионов.

В рассматриваемом приближении величина $-E_1^{(2)} = Q_{Ps}$ - сродство кристалла к атому Ps . Например, сродство ЩГК к атому Ps положительно и составляет величины в среднем 2,5 эВ.

В приближении точечных ионов вероятность спонтанной аннигиляции (самоаннигиляции) парапозитрония ($p-Ps$) в кристалле во втором порядке теории возмущения оказалась равной

$$\lambda_s = \lambda_s^0 \{1 + 2C_{100}^{(2)}\}, \quad (7)$$

где $\lambda_s^0 = 0,8 \cdot 10^{10} \text{ с}^{-1}$ - скорость самоаннигиляции $p-Ps$ в вакууме, $C_{100}^{(2)}$ - поправочный коэффициент второго порядка к волновой функции основного состояния невозмущенного атома Ps

$$C_{100}^{(2)} \approx - \sum_{\bar{g}} |C_{\bar{g}}|^2 \left[1 - \left(\frac{1}{1 + a_0^2 K^2} \right) \right]^2 \cdot \left(E_1 - \frac{\hbar^2 K^2}{4m_0} \right)^{-2} \quad (8)$$

В интервале $d = (2 \div 4) \text{ \AA}$ среднее значение $2C_{100}^{(2)} \approx -0,3$, то есть $\lambda_s \approx 0,7\lambda_s^0$. Опять таки расчетное значение $\tau_s = \lambda_s^{-1} \approx 1,8 \cdot 10^{-10} \text{ с}$ значительно меньше, чем наблюдаемое время жизни позитронов τ_2 .

Таким образом, по теории возмущения взаимодействие атома Ps с полем кристаллической решетки приводит к понижению энергии основного состояния и удлинению времени жизни относительно спонтанной аннигиляции. Вывод о положительности сродства кристалла к атому Ps является [72] по существу следствием антисимметричности возмущения (3) относительно замены $e^+ \leftrightarrow e^-$.

Блоховское состояние атома Ps в кристалле

В работах [5, 6, 8, 73, 74] для объяснения центрального и боковых пиков кривых УРАФ в монокристаллах кварца была предложена и развита гипотеза о блоховском состоянии атома Ps в кристалле. В рамках блоховского состояния [1, 9, 13-15, 21] в кристалле волновую функцию Ps можно записать в виде

$$\psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = \psi(\bar{r}, \bar{R}) = \varphi(\bar{R})\phi(\bar{r}) \quad (9)$$

При этом здесь волновая функция $\varphi(\bar{R})$ в (9) уже не является плоской волной, как обычно [8]. Согласно [5, 6, 8, 73, 74], функцию $\varphi(\bar{R})$ запишем в блоховском виде

$$\varphi(\bar{R}) = \frac{1}{\sqrt{N}} U_{\bar{K}} \exp(i\bar{K}\bar{R}); U_{\bar{K}} = \frac{1}{\Omega_0} \sum_{\bar{G}} a_{\bar{G}}(\bar{K}) \exp(i\bar{K}\bar{R}), \quad (10)$$

где по-прежнему \bar{g} - вектор обратной решетки: $\bar{G} = 2\pi\bar{g}$. При этом вероятность спонтанной 2γ - аннигиляции пара- Ps запишется в виде в виде

$$\lambda(\bar{p}) = \sum_{\bar{K}} f(\bar{K}, T) \lambda_{\bar{K}}(\bar{p}), \quad (11)$$

$$\lambda_{\bar{K}}(\bar{p}) = \pi_0^2 c \sum_{\bar{G}} |a_{\bar{G}}(\bar{K})|^2 \delta[\bar{p} - (\bar{K} + \bar{G})], \quad (12)$$

Здесь $f(\bar{K}, T)$ - максвелловское распределение по импульсам Ps .

Из выражения (12) непосредственно следует, что угловое распределение аннигиляционных гамма-квантов пара- Ps должно состоять из ряда пиков при значениях угла $\theta = 2\pi\hbar g_z / m_0 c$.

Естественно, что вклад в $\lambda(\bar{p})$ члена $I_{\bar{g}}$ с заданным значением вектора обратной решетки дается выражением

$$I_{\bar{g}} = \sum_{\bar{K}} f(\bar{K}, T) |a_{\bar{G}}(\bar{K})| \quad (13)$$

Так как Ps в кристалле термализован [5], то занятыми будут лишь состояния с $\bar{K} \ll \bar{G}$ ($g \neq 0$). Отсюда следует, что форма боковых и центрального пика в кривых УРАФ должны быть практически одинаковыми (форма пиков в основном определяется максвелловским множителем $f(\bar{K}, T)$, вследствие чего интенсивность боковых пиков будет гораздо меньше, чем интенсивность центрального пика, что и наблюдается в экспериментах.

Однако эта модель, как показали расчеты [5, 8], достаточно груба и не согласуется в полной мере с экспериментом. Это обусловлено в первую очередь тем, что в описание блоховского состояния Ps не «включены» валентные электроны кристалла и, в частности, не учитывается обменное взаимодействие электрона атома Ps с электронами кристалла. Этот эффект можно учесть в рамках теории Ходжеса и др. [75]

В этом случае для расчета спонтанной и «pick-off» - аннигиляции Ps с испусканием двух гамма-квантов используется волновая функция $\psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2)$, которую наложено условие ортогональности к одноэлектронным волновым функциям кристалла

$$\int \psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) \psi_i(\bar{r}_1) d\bar{r}_1 = 0 \quad (14)$$

Согласно методу ортогонализированных плоских волн (ОПВ) [1, 9, 13-15, 21], ортогонализированная волновая функция Ps в кристалле $\psi_0(\bar{r}_1, \bar{r}_2)$ строится следующим образом

$$\psi_0(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = \psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) - \sum_i \psi_i(\bar{r}_1) \left[\int \psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) \psi_i(\bar{r}_1) d\bar{r} \right] \quad (15)$$

Первое слагаемое в (15) определяет собой скорость самоаннигиляции Ps , тогда как второе есть скорость «pick-off» - аннигиляции. Здесь в отличие от подхода типа (8) следует, что боковые пики в кривых УРАФ обусловлены не функцией $\varphi(\bar{R})$ и поэтому в расчетах не принимались во внимание. Функция $\psi(\bar{r}) \equiv \psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2)$ бралась такой же, как и для Ps в вакууме.

Отсюда следует, что если атом Ps в состоянии $\psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2)$ с равной вероятностью обнаруживается в любой точке кристалла при $\varphi(\bar{R}) = \exp(i\bar{K}\bar{R})$, то в состоянии $\psi_0(\bar{r}_1, \bar{r}_2)$ указанная вероятность резко меняется при переходе от одного узла кристаллической решетки к другому, причем в различной мере в зависимости от направления. Заметим, что функция $\psi_0(\bar{r}_1, \bar{r}_2)$ обладает трансляционной симметрией кристаллической решетки. Поэтому отсюда следует, что, как и в случае (2), кривая УРАФ должна содержать серию боковых пиков. Численные расчеты интенсивностей пиков показали хорошее согласие с экспериментом [13]. Близкий (15) (3.156) подход в рамках метода эффективной массы был развит в [76, 77].

Метод эффективной массы. «Экситонная» модель атома Ps

Рассмотрим атом Ps большого радиуса («экситонное» состояние атома Ps) в кристалле. В этом случае, используя метод эффективной массы [5-8], решение уравнения Шредингера с гамильтонианом (1) можно записать в виде

$$\Psi(\bar{r}_-, \bar{r}_+) = \sum_{n;n'} \Phi(\bar{r}_-, \bar{r}_+) \Psi(\bar{r}_- - \bar{a}_n, \bar{r}_+ - \bar{a}_{n'}) \approx \sum_{n;n'} \Phi(\bar{r}_-, \bar{r}_+) \Psi(\bar{r}_- - \bar{a}_n), \Psi(\bar{r}_+ - \bar{a}_{n'}) \quad (16)$$

Здесь функция $\Phi(\bar{r}_-, \bar{r}_+)$ является решением уравнения

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_-} \Delta_-^2 - \frac{\hbar^2}{2m_+} \Delta_+^2 - \frac{e^2}{\varepsilon |\bar{r}_- - \bar{r}_+} \right] \Phi(\bar{r}_-, \bar{r}_+) = E \Phi(\bar{r}_-, \bar{r}_+), \quad (17)$$

где $\Psi(\bar{r}_- - \bar{a}_n)$ и $\Psi(\bar{r}_+ - \bar{a}_{n'})$ атомные волновые функции электрона и позитрона, центрированные на узлах решетки \bar{a}_n и $\bar{a}_{n'}$, соответственно, ε - диэлектрическая проницаемость (на частоте $\omega \sim E(Ps)/\hbar$; $E(Ps)$ - энергия связи атома Ps в кристалле. Формально решение уравнения (17) имеет вид (4).

Аннигиляционные характеристики атома Ps в состоянии, описываемом уравнением (17), были подробно изучены в работах [78-80]. Было установлено, что электронная плотность в нуле $|\Psi_1(0)|_m^2$ в атоме Ps в рамках экситонной модели равна

$$|\Psi_1(0)|_m^2 = \left[8 \left(\frac{m^*}{\varepsilon} \right)^3 \right] |\Psi_1(0)|^2 \quad (18)$$

где $m^* = m_- m_+ / (m_- + m_+)$ - приведенная эффективная масса атома Ps в кристалле. Таким образом, в рассматриваемой модели коэффициент α в (18) равен $8 \left(\frac{m^*}{\varepsilon} \right)^3 = \chi_{cr}$.

Позитрон и электрон в кристалле в состоянии (16) часть времени находится в зонном состоянии, а часть времени образуют атом позитрония. С учетом процесса pick-off аннигиляции скорости двухквантовой аннигиляции атомов p-Ps и o-Ps в состоянии в (14) приближенно могут быть представлены в следующей форме

$$\lambda_s^{ex} \approx a_z^2 \lambda_z + a_{Ps}^2 \lambda_s + a_{Ps}^2 \lambda_p \quad (19)$$

$$\lambda_t^{ex} \approx a_z^2 \lambda_z + a_{Ps}^2 \lambda_t + a_{Ps}^2 \lambda_p, \quad (20)$$

где a_z^2 и a_{Ps}^2 - коэффициенты, характеризующие собой вклад аннигиляции позитрона из зонного состояния и позитрониевого состояния, λ_z, λ_s и λ_t - скорости аннигиляции атома Ps в названных состояниях, причем скорость спонтанной аннигиляции позитронов в позитрониевых 1S_0 - и 3S_1 - состояниях в кристалле равны $\lambda_{s(t)} = \chi_{cr} \lambda_{s(t)}^0$; λ_p - скорость pick-off аннигиляции. Принимается, что скорость pick-off аннигиляции пропорциональна числу отрицательных ионов в единице объема кристалла n_A : $\lambda_p = \delta \pi_0^2 c n$, где δ - некоторая постоянная.

Скорость 3γ - аннигиляции ортопозитрония в экситонном состоянии равна $\lambda_{3\gamma}^{ex} = \chi_{cr} \lambda_t^0$, а параметр магнитного тушения позитрония равен

$$Q^{ex} \approx Q a_{Ps}^2 \frac{m_- m_+}{\chi_{cr}} \quad (21)$$

т.е. эффективное магнитное поле, действующее на атом Ps в кристалле $H_{eff} = H (a_{Ps}^2 m_- m_+ / \chi_{cr})^{1/2}$.

Итак, в экситонной модели атома Ps в кристалле собственно позитрониевые характеристики определяются параметрами m_-, m_+ и ε и, в частности, комбинацией этих параметров $8(m^* / \varepsilon)^3 = \chi_{cr}$. В зависимости от значения параметра χ_{cr} все вещества можно разбить на три группы: 1. При $\chi_{cr} = 1$, т.е. $m^* / \varepsilon > 0,5$, физические характеристики атома Ps в кристалле (веществе) те же, что и для свободного атома Ps . 2. При $\chi_{cr} > 1$, т.е. $m^* / \varepsilon = 0,5$ атом Ps «сжимается» Его размеры и время жизни относительно двух- и трехквантовой аннигиляции уменьшаются, В этом случае должна иметь место повышенная по сравнению с

$$P_{3\gamma} = I_2 \frac{\tau_2}{\tau_t^0} + \frac{1}{372} \left(1 - \frac{4}{3} I_2 \right) \quad (22)$$

вероятность 3γ - аннигиляции и аномально слабое магнитное тушения позитрония.

3. При $\chi_{cr} < 1$, т.е. $m^* / \varepsilon < 0,5$ атом Ps «разбухает». Его размеры и время жизни относительно двух- и трехквантовой аннигиляции увеличиваются. В этом случае имеет место пониженная по сравнению с (22) вероятность 3γ - аннигиляции и аномально сильное магнитное тушения позитрония.

Ниже приводятся полуэмпирические оценки параметров в формулах (17)-(22), которые позволяют получать разумные значения аннигиляционных характеристик атома Ps .

Оптическая модель атома Ps

Результаты предыдущего рассмотрения свойств атома Ps могут быть получены также в рамках сугубо химического подхода – на основе модели квазипозитрониевых комплексов – молекул типа $(A^{-\eta}Ps)$, в которой $A^{-\eta}$ – отрицательный ион с эффективным зарядом в кристалле η (в единицах заряда e). Модель квазипозитрониевых комплексов применялась (см., например, [5-9, 81, 82]) для качественного объяснения происхождения компоненты τ_2 и магнитного тушения этой компоненты в ионных кристаллах. Предполагается образование «химических соединений» позитрония типа $(Cle^-)e^+$, либо $Cl(e^-e^+)$, в которых две частицы (в круглых скобках) связаны более сильно, чем третья, с вероятностью синглетного состояния равной $1/4$, как в случае свободного атома Ps .

Предположение об образовании комплекса $(Cle^-)e^+$ позволяет объяснить наблюдаемую величину долгого времени жизни в ШГК. Аномально слабое магнитное тушение компоненты τ_2 в кристалле KCl в свою очередь более совместимо с образованием другого комплекса $Cl(e^-e^+)$. Но здесь возникает другая трудность: более короткое время жизни этого комплекса, по сравнению с $(Cle^-)e^+$, не позволяет определить наблюдаемую величину τ_2 .

Указанных противоречия можно устранить [13, 84], если основываться на концепции образования в кристалле квазипозитрониевых молекул $[A^{-\eta}Ps]_s$ и $[A^{-\eta}Ps]_t$, в которых постулируется однопозитронная связь по аналогии с одноэлектронной связью в молекулярном ионе водорода H_2^+ . Здесь индексы s и t относятся соответственно к синглетному и триплетному состояниям молекулы $[A^{-\eta}Ps]$. При этом предполагали следующую схему образования этих молекулярных комплексов $[A^{-\eta}Ps]$. Термализованные позитроны захватываются отрицательными ионами с образованием систем типа $A^{-\eta}e^+$. Помимо канала аннигиляции в кристалле возможны еще два канала распада таких систем $A^{-\eta}e^+ \rightarrow A^{-\eta+1} + Ps$, либо $A^{-\eta}e^+ \rightarrow A^{-\eta} + e^+$. В кристалле первый путь может оказаться энергетически более выгодным, чем второй.

Предполагается далее, что позитрон атома позитрония испытывает сильное притяжение со стороны отрицательного иона и обуславливает связь между атомом Ps и ионом $A^{-\eta}$. Соединения $[A^{-\eta}Ps]_s$ и $[A^{-\eta}Ps]_t$, образуются в кристалле со статистическими весами g_s и g_t и способны к трансляционному движению. По аналогии с ионом H_2^+ волновая функция позитрона в таких системах записывается в виде

$$\psi(\vec{r}_+) = a_A \varphi_1(\vec{r}_+) + a_{Ps} \varphi_2(\vec{r}_+), \quad (23)$$

где φ_1 и φ_2 – волновые функции позитрона соответственно. Квадраты коэффициентов в (23) представляют собой вклады $(A^{-\eta}e^+)e^-$ и $A^{-\eta}(e^+e^-)$ структур.

Скорость аннигиляции позитронов в рамках оптической модели атома Ps может быть представлена в виде

$$\lambda_s^{opt} \approx a_A^2 \lambda_A + a_{Ps}^2 \lambda_s + a_p^2 \lambda_p \quad (24)$$

$$\lambda_t^{opt} \approx a_A^2 \lambda_A + a_{Ps}^2 \lambda_t + a_p^2 \lambda_p \quad (25)$$

где λ_p - скорость аннигиляции позитронов в системе $A^{-n}e^+$, $\lambda_{s(t)}$ - скорость спонтанной аннигиляции системы (e^+e^-) в комплексе $(A^{-n}Ps)_{s(t)}$ в кристалле.

Модель сжатого атома Ps

Решение задачи об атоме водорода, заключенного в непроницаемую сферическую полость радиуса R , показывает, что при сжатии атома водорода его энергия связи уменьшается и становится отрицательной при некотором критическом значении R_{cr} [5-9]. Рассмотрим аналогичные основные свойства атома Ps в такой же полости [85-89]. Радиальную часть волновой функции основного состояния атома Ps в сферической полости запишем в виде

$$\psi_R(\rho) = A \exp\left(-\frac{\rho}{2}\right) F(-n+1, 2, \rho), \tag{26}$$

где $\rho = 2r/(na_{Ps})$, а $F(-n+1, 2, \rho)$ - вырожденная гипергеометрическая функция. Для свободного атома Ps в основном состоянии главное квантовое число $n=1$ и $F(-n+1, 2, \rho) = 1$.

Наложим на волновую функцию (26) условие

$$F(-n+1, 2, \rho_0) = 0; \rho_0 = \frac{2R}{na_{Ps}} \tag{27}$$

Из этого условия определяется эффективное квантовое число n , которое уже теперь не является целым положительным числом, а энергия основного состояния атома Ps находится из обычного выражения для водородоподобного атома [5-9].

Учитывая результаты расчетов Зоммерфельда-Велькера [85], находим, что энергия связи атома Ps становится отрицательной при

$$R < R_{cr} \approx 1,835 a_{Ps} \approx 1,94 \text{ \AA} \tag{28}$$

Электронная плотность в нуле, определяющая аннигиляционные характеристики атома Ps , является функцией радиуса полости

$$|\psi_R(0)|^2 \equiv |\psi_1(0)|_m^2 = \left\{ \int_0^R \exp\left(-\frac{2r}{na_{Ps}}\right) F^2\left(-n+1, 2, \frac{2r}{na_{Ps}}\right) r^2 dr \right\}^{-1} |\psi_1(0)|^2 \tag{29}$$

Множитель α в формуле (18) в модели сжатого атома позитрония оказывается при этом равным

$$\alpha = \left\{ 4 \int_0^R \exp\left(-\frac{2r}{na_{Ps}}\right) F^2\left(-n+1, 2, \frac{2r}{n}\right) r^2 dr \right\}^{-1}, \tag{30}$$

где r измеряется в единицах a_{Ps} . Соответственно, изменяются по сравнению с вакуумными значениями: превышение энергии триплетного состояния атома Ps над синглетным: $\Delta E_1(R) = \alpha \Delta E_1$; время жизни относительно спонтанной аннигиляции $\tau_{s(t)} = \tau_{s(t)}^0 / \alpha$;

параметр магнитного тушения: $Q_R = Q/\alpha$; вероятность трехквантовой аннигиляции (с учетом аннигиляции позитронов из состояний непозитрониевого типа):

$$P_{3\gamma}^R = I_2 \frac{\tau_2}{\tau_t^0} \alpha + \left(1 - \frac{4}{3} I_2\right) \frac{1}{372} \quad (31)$$

Результаты численных расчетов основных характеристик атома позитрония в зависимости от радиуса полости для наглядности представлены на рисунках работы [88]. Непосредственно видно, что сжатие атома Ps приводит одновременно с уменьшением энергии связи к уменьшению собственного времени жизни относительно аннигиляции и параметра магнитного тушения и, наоборот, к росту вероятности 3γ - аннигиляции в сравнении с нормальным атомом Ps .

По мере сжатия атома Ps в кристалле узкая компонента в кривых УРАФ будет все более отличаться по форме кривой УРАФ, соответствующей термализованному позитронию. Действительно, волновая функция, описывающая движение центра инерции атома позитрония, в случае сферически симметричной бесконечно-глубокой ямы имеет вид $\psi_k(r) = A \sin kr/r$, где A - нормировочная постоянная, а k - волновое число. Кривая УРАФ, вычисленная на этой функции $\psi_k(r)$, в рамках параллельно щелевой геометрии имеет вид

$$N\left(\beta = \frac{m_0 c R}{\hbar} \theta\right) = \text{const} \int_{\rho}^{\infty} \frac{dx}{x} \left(\frac{\sin x}{\pi^2 - x^2}\right)^2 \quad (32)$$

Численный расчет дает следующее значение полуширины кривой УРАФ

$$\Gamma_N = \frac{16,60}{\hbar}, \text{ мрад} \quad (33)$$

где R измеряется в \AA .

Таким образом, модель сжатого атома позитрония приводит к «ненаблюдаемости» позитрония в измерениях УРАФ и ВРАФ (вследствие малого времени жизни этого атома и большой ширины «узкой» компоненты), повышенной вероятности 3γ - аннигиляции по сравнению с вероятностью 3γ - аннигиляции Ps в вакууме, уменьшению эффективности тушения позитрония магнитным полем. Так, например, для значений $R = 2,012 \text{ \AA}$: $\tau_{s(t)} \approx 0,384\tau_{s(t)}^0$, $Q_R \approx 0,384Q$, $P_{3\gamma}^R \approx 2,61P_{3\gamma}$, $\Gamma_N \approx 5,25$ мрад. Это вполне приемлимые значения. Для сравнения приведем значения опытных величин: $\tau_{s(t)} \approx 0,384\tau_{s(t)}^0$, $Q_R \approx 0,25Q$ для KCl [9], $P_{3\gamma}^R \approx 2,2P_{3\gamma}$ для NaF [9]. К тому же надо иметь в виду отсутствие «явных следов» образования позитрония в спектрах УРАФ и ВРАФ.

Вместе с тем, значения множителя α в (18) для кристаллов $NaCl$ и LiF вопреки концепции сжатого позитрония меньше единицы (см. формулу (18)). Трудно согласовать также сравнительно большую вероятность образования позитрония (судя, например, по величине I_2) в ионных кристаллах с малой энергией связи сжатого позитрония (для значений $R = 2,012 \text{ \AA}$: энергия связи равна всего 0,755 эВ). В противоположность рассмотренным выше моделям концепции сжатого позитрония в кристалле предполагает наличие сил отталкивания между атомом позитрония и окружающими его ионами (атомами). Наконец, непроницаемость стенок полости не позволяет включить *pick-off*-аннигиляцию, необходимую для объяснения величины долгого времени жизни τ_2 .

Многоэлектронный поход к рассмотрению свойств атома позитрония в кристалле

Процесс образования атома позитрония в сильно полярных кристаллах можно уподобить процессу образования экситона Мотта [89-91]: электрон переходит из внешней замкнутой p – оболочки аниона в незанятое состояние s – оболочки катиона (этот процесс осуществляется за счет энергии замедляющегося в кристалле позитрона), а позитрон, образующий атом позитрония, занимает основное состояние квазиатома позитрон+анион. По аналогии с многоэлектронной теорией экситона Мотта в сильно полярных кристаллах [90, 91] волновую функцию системы атом позитрония+кристалл с несмещенными ионами можно представить в виде линейной комбинации волновых функций $C(\bar{G}, S, \bar{H}, M, \bar{R}, S_1, S_2, S_+)$ всех электронов кристалла и позитрона, в которых электрон из внешней оболочки анионного узла \bar{H} с магнитным квантовым числом M перешел в s – оболочку катионного узла \bar{G} со спином S_1 анионный узел остался со спином S_2 , а позитрон в этом случае связан с анионным узлом \bar{R} и имеет спин S_+ . Согласно [89-91] они имеют вид

$$C(\bar{G}, S, \bar{H}, M, \bar{R}, S_1, S_2, S_+) = \Theta(\bar{q}_{\bar{R}, S_+}, S_1) \sum_{\nu} (-1)^{\nu} P^{\nu} \prod_{\bar{h} m \sigma} \Theta(\bar{q}_{\bar{h} m \sigma}, s_{\bar{h} m \sigma}) \Theta(\bar{q}_{\bar{R}, S S_1}, S_1) \chi_{(\bar{h}, m, \sigma) \neq (\bar{H}, M, -S_+)}, \quad (34)$$

где I пробегает четыре значения $\Sigma, \varepsilon, \eta, \zeta$. Суммирование по $\bar{G}, \bar{R}, \bar{H}$ распространяется на весь кристалл.

Здесь Θ_{\dots} – однопозитронная и одноэлектронные ортонормированные волновые функции; P – оператор перестановки электронов; ν – кратность перестановки электронов; \bar{q}_{\dots} и s_z – координата и спин электрона (и позитрона); \bar{h} нумерует анионные узлы решетки; m и σ нумеруют состояния электрона в p – оболочке аниона, χ – волновая функция остальных электронов кристалла.

Из функций (34) можно образовать четыре базисные функции Ψ : одна для синглетного $S=0$ состояния (Σ) и три для триплетного $S=1$ состояния (ε, η, ζ) атома позитрония в кристалле.

Волновую функцию системы атом позитрония - кристалл в общем случае при этом можно записать в виде

$$\Psi = \sum_{\bar{G}, \bar{H}, \bar{R}, M, I} \Phi(\bar{G}, \bar{R} | I) \Psi(\bar{G}, S, \bar{H}, M, \bar{R}, S_2 | I), \quad (35)$$

где I пробегает четыре значения $\Sigma, \varepsilon, \eta, \zeta$. Суммирование по $\bar{G}, \bar{H}, \bar{R}$ распространяется на весь кристалл.

Для атома позитрония, движущего в кристалле с волновым вектором K , функция Φ должна стремиться к нулю с ростом $|\bar{G} - \bar{R}|$, а при трансляции \bar{G}, \bar{R} на вектор решетки – умножаться на экспоненциальный множитель, поэтому

$$\Phi(\bar{G}, \bar{R} | I) = \exp\{i\bar{K}(\alpha\bar{G} + \beta\bar{R})\} \varphi_{\nu}(\bar{G}, \bar{R} | I) \quad (36)$$

Здесь ν – совокупность квантовых чисел, характеризующих относительное движение в атоме позитрония.

В свою очередь [5-9] спинусредненная вероятность аннигиляции атома позитрония в кристалле в приближении (35) при $\bar{K} \rightarrow 0$ приближенно может быть представлена в следующем виде

$$\bar{\lambda} = g_A^2 \pi r_0^2 c \sum_n \int_V |C(q_1, \dots, q_n, \dots, q_N; q_+)|^2 \delta(\bar{q}_n - \bar{q}_+) d\bar{q}_1, \dots, d\bar{q}_n, \dots, d\bar{q}_N; \bar{q}_+ + g_P^2 \pi r_0^2 c \int_V |\varphi(\bar{q})|^2 \delta(\bar{q}) dq \quad (37)$$

Здесь $\bar{q} = \bar{q}_K - \bar{q}_G$. Коэффициент \bar{q}_K характеризует собой вклад двухквантовой аннигиляции позитрона, входящего в атом позитрония, с электронами кристалла, а \bar{q}_P^2 - вклад спинусредненной самоаннигиляции атома позитрония. В принятом приближении $\bar{q}_A^2 + \bar{q}_P^2 = 1$.

При расчете времени жизни атома позитрония в кристалле необходимо принять во внимание спиновые эффекты. Из формулы (37) следует, что скорость двухквантовой аннигиляции парапозитрония ($S = 0$) будет равна

$$\lambda_S = g_A^2 \pi r_0^2 c \sum_n \int_V |C(q_1, \dots, q_n, \dots, q_N; q_+)|^2 \delta(\bar{q}_n - \bar{q}_+) d\bar{q}_1, \dots, d\bar{q}_n, \dots, d\bar{q}_N; \bar{q}_+ + 4g_P^2 \pi r_0^2 c \int_V |\varphi(\bar{q})|^2 \delta(\bar{q}) dq \quad (38)$$

Скорость же двухквантовой аннигиляции ортопозитрония ($S = 1$) в кристалле равна просто первому члену в выражении (38).

Таким образом, этот результат качественно аналогичен результатам, полученным в экситонной модели и оптической моделях атома позитрония: для позитрония в кристалле помимо процессов двухквантовой самоаннигиляции парапозитрония и трехквантовой самоаннигиляции ортопозитрония имеется дополнительный канал двухквантовой аннигиляции позитрона в атоме позитрония с электронами кристалла, обусловленный зонным (атомным) состоянием позитрона в кристалле, наряду с *pick-off* - аннигиляцией позитрония, обусловленной трансляционным движением позитрония в кристалле.

Заключение

Итак, мы рассмотрели свойства Ps малого радиуса в экситонном представлении. Решающее значение данной проблемы состоит в использовании многоэлектронного подхода. Наиболее удачной моделью Ps малого радиуса является использование экситонного представления Ванье системы Ps + кристалл. В рамках этой модели удается естественно обосновать приближение «тяжелого» Ps малого радиуса и связанные с этим аномалии процесса аннигиляции. Рассмотренные механизмы переноса позволяют получить ряд очень новых ценных результатов. Наиболее важный из них заключается в том, что вероятности захвата Ps малого радиуса могут составлять величины $\approx 10^{11} c$, что сопоставимо с экспериментальными значениями скорости аннигиляции. Следовательно, в кристаллах с большой концентрацией дефектов Ps может аннигилировать именно из локализованных состояний.

Примечания:

1. Гольданский В.И., Прокопьев Е.П. Позитронные состояния в идеальных ионных кристаллах // Физика твердого тела. 1971. Т.13. Вып. 10. С. 2955-2964.
2. Арефьев К.П., Воробьев С.А., Прокопьев Е.П. Позитроника в радиационном материаловедении ионных структур и полупроводников. М.: Энергоатомиздат, 1983. 88 с.
3. Прокопьев Е.П., Тимошенко С.П., Графутин В.И., Мясищева Г.Г., Фунтиков Ю.В. Позитроника ионных кристаллов, полупроводников и металлов. М.: Ред.-изд. отдел МИЭТ, 1999. 176 с. (см. также <http://www.prokopov.narod.ru>).
4. Арифов П.У., Арутюнов Н.Ю., Прокопьев Е.П. и др. Квантовые свойства атомов и ионов и позитронная диагностика. Ташкент: ФАН, 1975. 242 с.

5. Арефьев К.П., Арифов П.У., Прокопьев Е.П. и др. Позитронсодержащие системы и позитронная диагностика. Ташкент: ФАН, 1978. 192 с.
6. 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".
7. Прокопьев Е.П., Кузнецов Ю.Н., Хашимов Ф.Р. Основы позитроники полупроводников. М., 1976. 343 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-2073. РИ.77.06.3412.
8. Кузнецов Ю.Н., Прокопьев Е.П., Варисов А.З. Основы теории позитронных состояний в ионных кристаллах. М., 1978. 292 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника", Р-2382. Сб. ВИМИ "Военная техника и экономика". Сер. общетехническая. №14. 1978.
9. Варисов А.З., Арефьев К.П., Воробьев А.А., Кузнецов Ю.Н., Прокопьев Е.П. Позитроны в конденсированных средах. М., 1977. 489 с. - Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-2317. Сб. ВИМИ "Военная техника и экономика". Сер. общетехническая. №9. 1978.
10. Варисов А.З., Кузнецов Ю.Н., Прокопьев Е.П. Аннигиляция позитронов в полимерах. М., 1978. 126 с. Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-2501. Сб. ВИМИ "Военная техника и экономика". Сер. общетехническая. №24. 1978.
11. Прокопьев Е.П. Исследования в области физики медленных позитронов. Позитронная аннигиляция - новый метод изучения строения вещества. М., 1986. 86 с. Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-4367. Сб. реф. НИОКР, обзоров, переводов и деп. рукописей. Сер."ИМ". №12. 1987.
12. В.И.Графутин, Е.П.Прокопьев. Применение позитронной аннигиляционной спектроскопии для изучения строения вещества // Успехи физических наук. 2002. Т.172. №1. С. 67-83.
13. Бартенев Г.М., Цыганов А.Д., Прокопьев Е.П., Варисов А.З. Аннигиляция позитронов в ионных кристаллах // Успехи физических наук. 1971. Т. 103. Вып. 2. С. 339.
14. Бартенев Г.М., Варисов А.З., Гольданский В.И., Прокопьев Е.П., Цыганов А.Д. Определение эффективных зарядов анионов в средах ионного типа позитронным методом // Успехи химии. 1972. Т.41. Вып. 4. С. 585.
15. Варисов А.З., Кузнецов Ю.Н., Прокопьев Е.П., Филиппев А.И. Физика и химия превращений позитронов и позитрония в полимерах // Успехи химии. 1980. Т.50. Вып. 4. С. 1892-1922.
16. Графутин В.И., Прокопьев Е.П., Фунтиков Ю.В. Позитронная аннигиляционная спектроскопия в ИТЭФ. Инженерная физика. Специальный выпуск. 2007. №1. С.33-39.
17. Гольданский В.И., Иванова А.В., Прокопьев Е.П. Применение метода Хартри-Фока к задачам аннигиляции позитронов в конденсированных средах ионного типа // В кн.: Ядерная химия М.: Наука, 1965. С. 249-267.
18. Прокопьев Е.П. Позитронсодержащие атомные системы в пылевой космической плазме и гидридах щелочных металлов. 1D=1258785857. Научная Онлайн-Библиотека Порталус: http://www.portalus.ru/modules/science/rus_readme.php.
19. Прокопьев Е.П. Системы со многими позитронами и электронами. I. Позитроны и позитроний, позитронные и позитрониевые комплексы в твердых телах. 1D=1258784365. Научная Онлайн-Библиотека Порталус (www.portalus.ru): http://www.portalus.ru/modules/science/rus_readme.php.
20. Прокопьев Е.П. Позитроны, позитроний, позитронные и позитрониевые комплексы в кристалле. Особенности их свойств в атмосфере фононов. 1D=1258783891. Научная Онлайн-Библиотека Порталус: http://www.portalus.ru/modules/science/rus_readme.php.
21. Прокопьев Е.П. Проблема физики и химии антивещества: возможности исследования свойств, поиска во Вселенной, синтеза и применений. ID=1259043626. Научная Онлайн-Библиотека Порталус: http://www.portalus.ru/modules/science/rus_readme.php.
22. Прокопьев Е.П. Возможные проблемы физики, химии и технологии антивещества: синтез, исследования свойств и применения. ID=1259044629. Научная Онлайн-Библиотека Порталус: http://www.portalus.ru/modules/science/rus_readme.php

23. Прокопьев Е.П. Антивещество: получение, свойства, применения. ID=1261922222. Научная Онлайн-Библиотека Порталус: http://www.portalus.ru/modules/science/rus_readme.php.
24. Прокопьев Е.П. Развитие методов позитронной аннигиляционной спектроскопии для определения размеров нанобъектов в пористых системах, дефектных материалах и наноматериалах. ID=1263401871. Научная Онлайн-Библиотека Порталус: http://www.portalus.ru/modules/science/rus_readme.php
25. Суворов А.Л., Богданович Б.Ю., Залужный А.Г., Графутин В.И., Калугин В.В., Нестерович А.В., Прокопьев Е.П., Тимошенков С.П., Чаллыгин Ю.А. Технологии структур кремний на изоляторе: Монография. ID=1266993069. Научная Онлайн-Библиотека Порталус: http://www.portalus.ru/modules/science/rus_readme.php; http://www.portalus.ru/modules/science/rus_readme.php?category=19.
26. Графутин В.И., Прокопьев Е.П., Фунтиков Ю.В. Развитие методов позитронной аннигиляционной спектроскопии для определения размеров нанобъектов в пористых системах, дефектных материалах и наноматериалах. Научная Онлайн-Библиотека Порталус: http://www.portalus.ru/modules/science/rus_readme.php and <http://www.physics-online.ru>. Рубрика: Химическая физика, физическая химия и материаловедение
27. 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., С. 679-709. <http://www.niipmt.ru/index.php?p=6> <http://www.niipmt.ru/index.php?p=61>
28. S. Mohorovičić // *Astronom. Nachr.* 1934. Vol. 259. P. 94.
29. A. Ruark // *Phys. Rev.* 1945. Vol. 68. P. 278.
30. Гольданский В.И. Физическая химия позитрона и позитрония. М.: Наука, 1968. 368 с.
31. J. A. Wheeler. Polyelectron systems // *Ann. N. Y. Acad. Sci.* 1946. Vol. 48. P. 219.
32. Д. Иваненко, А.Соколов // *ДАН СССР.* 1947. Т. 58. С. 1329.
33. Д. Иваненко, А.Соколов // *Вестн. МГУ.* 1947. № 6. С. 3.
34. J. Pirrene // *Arch. Sci.* 1946. Vol. 28. P. 233; 1947. Vol. 207. P. 121, 207, 265.
35. Л.Д. Ландау // *ДАН СССР.* 1948. Т. 60. С. 207
36. И.Я. Померанчук // *ДАН СССР.* 1948. Т. 60. С. 213.
37. Е.М. Лифшиц // *ДАН СССР.* 1948. Т. 60. С. 211.
38. Д.Д. Иваненко, А.А. Соколов // *ДАН СССР.* 1948. Т.61. С. 51.
39. А.А. Соколов, А.И.Мухтаров // *Вестн. МГУ.* 1948. №8. С. 1696.
40. A. Ore, J. Powell // *Phys. Rev.* 1949. Vol.75. P.278.
41. В.Б. Берестецкий, Л.Д. Ландау // *ЖЭТФ.* 1949. Т. 19. С. 673.
42. В.Б. Берестецкий // *ЖЭТФ.* 1949. Т. 19. С. 1130.
43. C. Yang // *Phys. Rev.* 1950. Vol. 77. P. 242.
44. А.И.Мухтаров // Диссертация. МГУ. Москва. 1950.
45. R. Ferrell // *Phys. Rev.* 1951. Vol. 84. P. 858.
46. А.А. Соколов, В.Н. Цытович // *ЖЭТФ.* 1953. Т. 24. С. 253.
47. К.А. Туманов, Ю.М. Широков // *ЖЭТФ.* 1953. Т. 24. С. 369.
48. К.А. Туманов // *ЖЭТФ.* 1953. Т. 25. С. 385.
49. R. Karplus, A. Klein // *Phys. Rev.* 1952. Vol. 87. P. 848.
50. T. Fulton, P. Martin // *Phys. Rev.* 1954. Vol. 93. P. 903.
51. O. Halpern // *Phys. Rev.* 1956. Vol. 102. P. 1542.
52. R. Drisko // *Phys. Rev.* 1954. Vol. 94. P. 904.
53. W. Teusch, W. Hughes // *Phys. Rev.* 1956. Vol. 103. P. 1266.
54. L. Page // *Phys. Rev.* 1957. Vol. 106. P. 394.
55. W. Hughes, S. Marder, C. Wu // *Phys. Rev.* 1957. Vol. 106. P. 934.
56. Ю.А. Тарасов // *ЖЭТФ.* 1957. Т. 33. С. 707.
57. А.И. Алексеев // *ЖЭТФ.* 1958. Т. 34. С. 1195; 1959. Т. 36. С. 1839.
58. J. Schechter // *Phys. Rev.* 1963. Vol. 132. P. 841.
59. В.П. Шмелев // Диссертация. МГУ. Москва. 1960.

60. А. А. Власов // *Астрономический журнал*. 1964. Т. 41. С. 893.
61. J.M. Jauch, F. Rohlich. *The Theory of Photons and Electrons*. Addison – Wesley Publ. Comp., Inc. Reading, Massachusetts, 1968.
62. А.И. Ахиезер, В.Б. Берестецкий. *Квантовая электродинамика*. ГИФМЛ, М., 1959.
63. А.А. Соколов. *Введение в квантовую электродинамику*. ГИФМЛ, М., 1958.
64. J. Green, J. Lee. *Positronium Chemistry*/ Acad. Press. New York. 1964.
65. И.Померанчук // *ЖЭТФ*. 1949. Т. 19. С. 183.
66. Е.П.Прокопьев. Список публикаций: [http://skachate.ru/himiya/5250 /index.html?page=23](http://skachate.ru/himiya/5250/index.html?page=23)
67. P.A.M.Dirac // *Proc. Cambr.Phil. Soc.* 1930. Vol. 26. P. 361.
68. De Benedetti S *Nuovo Cimento* 4 Suppl. 1209 (1956).
69. Ferrante G. *Annihilation from Positronium Negative Ion $e^-e^+e^-$* *Phys. Rev.* **170** 76 (1968)
70. M. Deutsch // *Progr. Nucl. Phys.* 1953. Vol.3. P. 131.
71. S.M.Neamten. R.I.Verrall // *Phys. Rev.* 1963. Vol.131. P. 1023.
72. Г.М.Бартенев, М.Н.Плетнев. Е.П.Прокопьев. А.Д.Цыганов // *ФТТ*. 1970. Т.12. С. 2733.
73. Г.М.Бартенев, А.З.Варисов, А.В.Иванова, М.Н.Плетнев. Е.П.Прокопьев. А.Д.Цыганов // *ФТТ*. 1972. Т. 14. С. 715.
74. A.Greenberger, A.T.Mills, A.Tompson, S.Berko // *Phys. Lett.* 1970. Vol.32A. P. 72.
75. A.Stewart, C.H.Hodges, B.A.A.McKee, W.Triftshauser // *Bull. Am. Phys. Soc.* 1970. Vol. 15. P. 811.
76. C.Hodges, B.McKee, F.Triftshauser, A.T.Stewart // *Canad. J Phys.* 1972. Vol. 50. P. 103.
77. A.Bisi, G.Gamborini, L.Zappa // *Phys. Lett.* 1971. Vol.35A. P.193.
78. G.Coussot // *Phys. Rev.* 1969. Vol.30A. P. 1325.
79. Гольданский В.И., Прокопьев Е.П. Позитронные состояния в идеальных ионных кристаллах // *Физика твердого тела*. 1971. Т. 13. Вып. 10. С. 2955-2964.
80. Прокопьев Е.П. О возможности применения метода аннигиляции позитронов для характеристики экситонных состояний в ионных кристаллах // *Известия ТСХА*. 1970. №1. С. 227-230.
81. Прокопьев Е.П. Аномальное тушение триплетного позитрония магнитным полем в конденсированной фазе // *Известия ТСХА*. 1970. №5. С. 197-203.
82. A.Bisi, A.Fiorentini, L.Zappa // *Phys. Rev.* 1963. Vol.131. P. 1023.
83. A.Bisi, A.Fiorentini, L.Zappa // *Phys. Rev.* 1964. Vol.134A. P. 328.
84. Прокопьев Е.П. // *Оптика и спектроскопия*. 1974. Т.36. С. 361-365.
85. S.DeBenedetti, C.Cowan, W.Conecker, H.Primakoff // *Phys. Rev.* 1950. Vol. 77. P. 205.
86. R.de Zafra, W. Joyner // *Phys. Rev.* 1958. Vol. 112. P. 19.
87. W.Brandt, S.Berko, W.W.Walker // *Phys. Rev.* 1960. Vol. 120. P. 1289.
88. А.Э.Варисов. Дисс. канд. наук. М., 972.
89. Е.П.Светлов-Прокопьев. 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. Г.Г. Бондаренко. М.: ГНУ «НИИ ПМТ», 2008. С. 679-709.
90. С.А. Москаленко // *Оптика и Спектроскопия*. 1958. Т.5. С. 147.
91. С.А. Москаленко, К.Б. Толпыго // *ЖЭТФ*. Т. 36. С. 149.

References:

1. Gol'danskii V.I., Prokop'ev E.P. Pozitronnye sostoyaniya v ideal'nykh ionnykh kristallakh // *Fizika tverdogo tela*. 1971. Т. 13. Вып. 10. С. 2955-2964.
2. Aref'ev K.P., Vorob'ev S.A., Prokop'ev E.P. *Pozitronika v radiatsionnom materialovedenii ionnykh struktur i poluprovodnikov*. М.: Ergoatomizdat, 1983. 88 s.
3. Prokop'ev E.P., Timoshenkov S.P., Grafutin V.I., Myasishcheva G.G., Funtikov Yu.V. *Pozitronika ionnykh kristallov, poluprovodnikov i metallov*. М.: Red.-izd. otdel MIET, 1999. 176 с. (sm. takzhe <http://www.prokopep.narod.ru>).

4. Arifov P.U., Arutyunov N.Yu., Prokop'ev E.P. i dr. Kvantovye svoistva atomov i ionov i pozitronnaya diagnostika. Tashkent: FAN, 1975. 242 s.
5. Aref'ev K.P., Arifov P.U., Prokop'ev E.P. i dr. Pozitronsoderzhashchie sistemy i pozitronnaya diagnostika. Tashkent: FAN, 1978. 192 s.
6. Prokop'ev E.P. Vvedenie v teoriyu pozitronnykh protsessov v poluprovodnikakh i ionnykh kristallakh. M., 1979. 384 s. Dep. v TsNII "Elektronika". R-2837. MRS VIMI "Tekhnika, tekhnologiya, ekonomika". № 27. 1980. Ser. "ER".
7. Prokop'ev E.P., Kuznetsov Yu.N., Khashimov F.R. Osnovy pozitroniki poluprovodnikov. M., 1976. 343 s. - Dep. v TsNII "Elektronika". R-2073. RI.77.06.3412.
8. Kuznetsov Yu.N., Prokop'ev E.P., Varisov A.Z. Osnovy teorii pozitronnykh sostoyanii v ionnykh kristallakh. M., 1978. 292 s. - Dep. v TsNII "Elektronika", R-2382. Sb. VIMI "Voennaya tekhnika i ekonomika". Ser. obshchetekhnicheskaya. №14. 1978.
9. Varisov A.Z., Aref'ev K.P., Vorob'ev A.A., Kuznetsov Yu.N., Prokop'ev E.P. Pozitrony v kondensirovannykh sredakh. M., 1977. 489 s. - Dep. v TsNII "Elektronika". R-2317. Sb. VIMI "Voennaya tekhnika i ekonomika". Ser. obshchetekhnicheskaya. №9. 1978.
10. Varisov A.Z., Kuznetsov Yu.N., Prokop'ev E.P. Annigilyatsiya pozitronov v polimerakh. M., 1978. 126 s. Dep. v TsNII "Elektronika". R-2501. Sb. VIMI "Voennaya tekhnika i ekonomika". Ser. obshchetekhnicheskaya. №24. 1978.
11. Prokop'ev E.P. Issledovaniya v oblasti fiziki medlennykh pozitronov. Pozitronnaya annigilyatsiya - novyi metod izucheniya stroeniya veshchestva. M., 1986. 86 s. Dep. v TsNII "Elektronika". R-4367. Sb. ref. NIOKR, obzorov, perevodov i dep. rukopisei. Ser."IM". №12. 1987.
12. V.I.Grafutin, E.P.Prokop'ev. Primenenie pozitronnoi annigilyatsionnoi spektroskopii dlya izucheniya stroeniya veshchestva // Uspekhi fizicheskikh nauk. 2002. T.172. №1. S.67-83.
13. Bartenev G.M., Tsyganov A.D., Prokop'ev E.P., Varisov A.Z. Annigilyatsiya pozitronov v ionnykh kristallakh // Uspekhi fizicheskikh nauk. 1971. T.103. Vyp.2. S.339.
14. Bartenev G.M., Varisov A.Z., Gol'danskii V.I., Prokop'ev E.P., Tsyganov A.D. Opredelenie effektivnykh zaryadov anionov v sredakh ionnogo tipa pozitronnym metodom // Uspekhi khimii. 1972. T.41. Vyp.4. S.585.
15. Varisov A.Z., Kuznetsov Yu.N., Prokop'ev E.P., Filip'ev A.I. Fizika i khimiya prevrashchenii pozitronov i pozitroniya v polimerakh // Uspekhi khimii. 1980. T.50. Vyp.4. S.1892-1922.
16. V.I.Grafutin, E.P.Prokop'ev, Yu.V.Funtikov. Pozitronnaya annigilyatsionnaya spektroskopiya v ITEF. Inzhenernaya fizika. Spetsial'nyi vypusk. 2007. №1. S.33-39.
17. Gol'danskii V.I., Ivanova A.V., Prokop'ev E.P. Primenenie metoda Khartri-Foka k zadacham annigilyatsii pozitronov v kondensirovannykh sredakh ionnogo tipa // V kn.: Yadernaya khimiya M.: Nauka, 1965. S.249-267.
18. E.P.Prokop'ev. Pozitronsoderzhashchie atomnye sistemy v pylevoi kosmicheskoi plazme i gidridakh shchelochnykh metallov. ID=1258785857. Hauchnaya Onlain-Biblioteka Portalus: http://www.portalus.ru/modules/science/rus_readme.php.
19. E.P.Prokop'ev. Sistemy so mnogimi pozitronami i elektronami. I. Pozitrony i pozitronii, pozitronnye i pozitronievye komplekсы v tverdykh telakh. ID=1258784365. Hauchnaya Onlain-Biblioteka Portalus (www.portalus.ru): http://www.portalus.ru/modules/science/rus_readme.php.
20. E.P.Prokop'ev. Pozitrony, pozitronii, pozitronnye i pozitronievye komplekсы v kristalle. Osobennosti ikh svoistv v atmosfere fononov. ID=1258783891. Hauchnaya Onlain-Biblioteka Portalus: http://www.portalus.ru/modules/science/rus_readme.php.
21. E.P.Prokop'ev. Problema fiziki i khimii antiveshchestva: vozmozhnosti issledovaniya svoistv, poiska vo Vselennoi, sinteza i primeneni. ID=1259043626. Hauchnaya Onlain-Biblioteka Portalus: http://www.portalus.ru/modules/science/rus_readme.php.
22. E.P.Prokop'ev. Vozmozhnye problemy fiziki, khimii i tekhnologii antiveshchestva: sintez, issledovaniya svoistv i primeneniya. ID=1259044629. Hauchnaya Onlain-Biblioteka Portalus: http://www.portalus.ru/modules/science/rus_readme.php.
23. E.P.Prokop'ev. Antiveshchestvo: poluchenie, svoistva, primeneniya. ID=1261922222. Hauchnaya Onlain-Biblioteka Portalus: http://www.portalus.ru/modules/science/rus_readme.php.

24. E.P.Prokop'ev. Razvitie metodov pozitronnoi annigilyatsionnoi spektroskopii dlya opredeleniya razmerov nanoob"ektov v poristyykh sistemakh, defektnyykh materialakh i nanomaterialakh. ID=1263401871. Hauchnaya Onlain-Biblioteka Portalus: http://www.portalus.ru/modules/science/rus_readme.php

25. Suvorov A.L., Bogdanovich B.Yu., Zaluzhnyi A.G., Grafutin V.I., Kalugin V.V., Nesterovich A.V., Prokop'ev E.P., Timoshenkov S.P., Chaplygin Yu.A. Tekhnologii struktur kremnii na izolyatore: Monografiya. ID=1266993069. Hauchnaya Onlain-Biblioteka Portalus: http://www.portalus.ru/modules/science/rus_readme.php; http://www.portalus.ru/modules/science/rus_readme.php?category=19.

26. V.I.Grafutin, E.P.Prokop'ev, Yu.V.Funtikov. Razvitie metodov pozitronnoi annigilyatsionnoi spektroskopii dlya opredeleniya razmerov nanoob"ektov v poristyykh sistemakh, defektnyykh materialakh i nanomaterialakh. Hauchnaya Onlain-Biblioteka Portalus: http://www.portalus.ru/modules/science/rus_readme.php and <http://www.physics-online.ru>. Rubrika: Khimicheskaya fizika, fizicheskaya khimiya i materialovedenie

27. E.P.Svetlov-Prokop'ev. Issledovanie svoystv atoma pozitroniya v kristallakh. Trudy XVIII Mezhdunarodnogo soveshchaniya "Radiatsionnaya fizika tverdogo tela". (Sevastopol', 7–12 iyulya 2008 g.), pod redaktsiei zasluzhennogo deyatelya nauki RF, d.f.-m.n., prof. Bondarenko G.G. M.: GNU «NII PMT», 2008 g., C. 679-709. <http://www.niipmt.ru/index.php?p=6>
<http://www.niipmt.ru/index.php?p=61>

28. S. Mohorovi // *Astronom. Nachr.* 1934. Vol. 259. P. 94.

29. A. Ruark // *Phys. Rev.* 1945. Vol. 68. P. 278.

30. V.I. Gol'danskii. *Fizicheskaya khimiya pozitrona i pozitroniya*. M.: Nauka, 1968. 368 p.

31. J. A.Wheeler. *Polyelectron systems* // *Ann. N. Y. Acad. Sci.* 1946. Vol. 48. P. 219.

32. D. Ivanenko, A.Sokolov // *DAN SSSR.* 1947. T. 58. S. 1329.

33. D. Ivanenko, A.Sokolov // *Vestn. MGU.* 1947. № 6. S. 3.

34. J. Pirrene // *Arch. Sci.* 1946. Vol. 28. P. 233; 1947. Vol. 207. P. 121, 207, 265.

35. L.D. Landau // *DAN SSSR.* 1948. T. 60. S. 207

36. I.Ya. Pomeranchuk // *DAN SSSR.* 1948. T. 60. S. 213.

37. E.M. Lifshits // *DAN SSSR.* 1948. T. 60. S. 211.

38. D.D. Ivanenko, A.A. Sokolov // *DAN SSSR.* 1948. T.61. S.51.

39. A.A. Sokolov, A.I.Mukhtarov // *Vestn. MGU.* 1948. №8. S. 1696.

40. A. Ore, J. Powell // *Phys. Rev.* 1949. Vol.75. P.278.

41. V.B. Berestetskii, L.D. Landau // *ZhETF.* 1949. T. 19. S. 673.

42. V.B. Berestetskii // *ZhETF.* 1949. T. 19. S. 1130.

43. C. Yang // *Phys. Rev.* 1950. Vol. 77. P. 242.

44. A.I.Mukhtarov // *Dissertatsiya.* MGU. Moskva. 1950.

45. R. Ferrell // *Phys. Rev.* 1951. Vol. 84. P. 858.

46. A.A. Sokolov, V.N. Tsytovich // *ZhETF.* 1953. T. 24. S. 253.

47. K.A. Tumanov, Yu.M. Shirokov // *ZhETF.* 1953. T. 24. S. 369.

48. K.A. Tumanov // *ZhETF.* 1953. T. 25. S. 385.

49. R. Karplus, A. Klein // *Phys. Rev.* 1952. Vol. 87. P. 848.

50. T. Fulton, P. Martin // *Phys. Rev.* 1954. Vol. 93. P. 903.

51. O. Halpern // *Phys. Rev.* 1956. Vol. 102. P. 1542.

52. R. Drisko // *Phys. Rev.* 1954. Vol. 94. P. 904.

53. W. Teusch, W. Hughes // *Phys. Rev.* 1956. Vol. 103. P. 1266.

54. L. Page // *Phys. Rev.* 1957. Vol. 106. P. 394.

55. W. Hughes, S. Marder, C. Wu // *Phys. Rev.* 1957. Vol. 106. P. 934.

56. Yu.A. Tarasov // *ZhETF.* 1957. T. 33. S. 707.

57. A.I. Alekseev // *ZhETF.* 1958. T. 34. S. 1195; 1959. T. 36. S. 1839.

58. J. Schechter // *Phys. Rev.* 1963. Vol. 132. P. 841.

59. V.P. Shmelev // *Dissertatsiya.* MGU. Moskva. 1960.

60. A. A. Vlasov // *Astronomicheskii zhurnal.* 1964. T. 41. S. 893.

61. J.M. Jauch, F. Rohlich. *The Theory of Photons and Electrons.* Addison – Wesley Publ. Comp., Inc. Reading, Massachusetts, 1968.

62. A.I. Akhiezer, V.B. Berestetskii. *Kvantovaya elektrodinamika.* GIFML, M., 1959.

63. A.A. Sokolov. *Vvedenie v kvantovuyu elektrodinamiku.* GIFML, M., 1958.

64. J. Green, J. Lee. Positronium Chemistry/ Acad. Press. New York. 1964.
65. I.Pomeranchuk // ZhZTF. 1949. T. 19. S. 183.
66. E.P.Prokop'ev. Spisok publikatsii: [http://skachate.ru/himiya/5250 /index.html?page=23](http://skachate.ru/himiya/5250/index.html?page=23)
67. P.A.M.Dirac // Proc. Cambr.Phil. Soc. 1930. Vol. 26. P. 361.
68. De Benedetti S Nuovo Cimento 4 Suppl. 1209 (1956).
69. Ferrante G. Annihilation from Positronium Negative Ion $e-e+e-$ Phys. Rev. 170 76 (1968)
70. M. Deutsch // Progr. Nucl. Phys. 1953. Vol.3. P. 131.
71. S.M.Neamten. R.I.Verrall // Phys. Rev. 1963. Vol.131. P. 1023.
72. G.M.Bartenev, M.N.Pletnev. E.P.Prokop'ev. A.D.Tsyganov // FTT. 1970. T.12. S. 2733.
73. G.M.Bartenev, A.Z.Varisov, A.V.Ivanova, M.N.Pletnev. E.P.Prokop'ev. A.D.Tsyganov // FTT. 1972. T. 14. S. 715.
74. A.Greenberger, A.T.Mills, A.Tompson, S.Berko // Phys. Lett. 1970. Vol.32A. P. 72.
75. A.Stewart, C.H.Hodges, B.A.A.McKee, W.Triftshauser // Bull. Am. Phys. Soc. 1970. Vol. 15. P. 811.
76. C.Hodges, B.McKee, F.Triftshauser, A.T.Stewart // Canad. J Phys. 1972. Vol. 50. P. 103.
77. A.Bisi, G.Gamborini, L.Zappa // Phys. Lett. 1971. Vol.35A. P.193.
78. G.Coussot // Phys. Rev. 1969. Vol. 30A. P. 1325.
79. Gol'danskii V.I., Prokop'ev E.P. Pozitronnye sostoyaniya v ideal'nykh ionnykh kristallakh // Fizika tverdogo tela. 1971. T. 13. Vyp. 10. S. 2955-2964.
80. Prokop'ev E.P. O vozmozhnosti primeneniya metoda annigilyatsii pozitronov dlya kharakteristiki eksitonnykh sostoyanii v ionnykh kristallakh // Izvestiya TSKhA. 1970. №1. S. 227-230.
81. Prokop'ev E.P. Anomal'noe tushenie tripletного pozitroniya magnitnym polem v kondensirovannoi faze // Izvestiya TSKhA. 1970. №5. S. 197-203.
82. A.Bisi, A.Fiorentini, L.Zappa // Phys. Rev. 1963. Vol.131. P. 1023.
83. A.Bisi, A.Fiorentini, L.Zappa // Phys. Rev. 1964. Vol.134A. P. 328.
84. Prokop'ev E.P. // Optika i spektroskopiya. 1974. T.36. S. 361-365.
85. S.DeBenedetti, C.Cowan, W.Conecker, H.Primakoff // Phys. Rev. 1950. Vol. 77. P. 205.
86. R.de Zafra, W. Joyner // Phys. Rev. 1958. Vol. 112. P. 19.
87. W.Brandt, S.Berko, W.W.Walker // Phys. Rev. 1960. Vol. 120. P. 1289.
88. A.E.Varisov. Diss. kand. nauk. M., 972.
89. E.P.Svetlov-Prokop'ev. Issledovanie svoystv atoma pozitroniya v kristallakh. Trudy XVIII Mezhdunarodnogo soveshchaniya "Radiatsionnaya fizika tverdogo tela". (Sevastopol', 7-12 iyulya 2008 g.), pod redaktsiei zasluzhennogo deyatelya nauki RF, d.f.-m.n., prof. G.G. Bondarenko. M.: GNU «NII PMT», 2008. S. 679-709.
90. S.A.Moskalenko // Optika i Spektroskopiya. 1958. T.5. S. 147.
91. S.A.Moskalenko, K.B.Tolpygo // ZhETF. T. 36. S. 149.

УДК 735.29

Атом позитрония в ионных кристаллах

Евгений Петрович Прокопьев

НИЦ «Курчатовский институт», Федеральное государственное бюджетное учреждение «Государственный научный центр Российской Федерации - Институт Теоретической и Экспериментальной Физики».

Адрес: ул. Б.Черемушкинская, 25, Москва, Россия, 117218

E-mail: epprokopiev@mail.ru

Аннотация. В обзорной статье рассмотрены свойства атома позитрония (Ps) малого радиуса в экситонном представлении. Решающее значение данной проблемы состоит в

использовании многоэлектронного подхода. Наиболее удачной моделью Ps малого радиуса является использование экситонного представления Ванье системы Ps + кристалл. В рамках этой модели удается естественно обосновать приближение «тяжелого» Ps малого радиуса и связанные с этим аномалии процесса аннигиляции. Рассмотренные механизмы переноса позволяют получить ряд очень новых ценных результатов. Наиболее важный из них заключается в том, что вероятности захвата Ps малого радиуса могут составлять величины $\approx 10^{11} c$, что сопоставимо с экспериментальными значениями скорости аннигиляции. Следовательно, в кристаллах с большой концентрацией дефектов Ps может аннигилировать именно из локализованных состояний.

Ключевые слова: Атом позитрония; ионные кристаллы; обзор.