Vol. A58 (1980) ACTA PHYSICA POLONICA No 5

КВАНТОВО-СТАТИСТИЧЕСКОЕ РАССМОТРЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ПОЗИТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ПРОЦЕСС ЗАХВАТА ПОЗИТРОНА ДЕФЕКТАМИ В МЕТАЛЛАХ

QUANTUM-STATISTICAL ANALYSIS OF THE INFLUENCE OF POSITRON-PHONON INTERACTION ON POSITRON TRAPPING AT DEFECTS IN METALS

Р. Х. Сабиров

Физический факультет, Московский государственный педагогический институт им. В. И. Ленина*

(Поступила в редакцию 1-го аврела 1980 г.)

A theory of the positron trapping by defects in metals is developed by means of the Zubarev non-equilibrium statistical operator. The influence of the positron-phonon interaction on the positron trapping is considered in detail. New positron trapping mechanism is proposed. This mechanism involves both the creation of the electron-hole pair and the creation or destruction of the phonon. It is shown that the proposed mechanism predicts a linear temperature dependence of the trapping probability in the high-temperature case. Our results indicate that the trapping rate increases with the temperature rising.

PACS numbers: 71.60.+z, 05.20.Dd, 61.70.Rj

1. *Введение*

В последнее время метод аннигиляции позитронов широко используется для изучения различных дефектов в металлах, в частности вакансий [1—3] и дислокаций [4—6]. Позитронная техника дает в руки исследователя довольно простой метод определения ряда важных характеристик дефектов, например, энергии образования вакансий.

Для интерпретации экспериментальных результатов необходимо знать скорость захвата позитрона дефектами и в особенности температурную зависимость этой скорости. Существуют различные модели процесса захвата, которые в основном можно разделить на две группы: модели, рассматривающие позитрон как классическую частицу [7—9], и модели, основанные на квантово-механическом расчете [10—14].

* Address: Faculty of Physics, V. I. Lenin Moscow State Pedagogical Institute, 119435 Moscow, USSR.

Причем квантовый расчет, в отличие от классического, указывает на отсутствие температурной зависимости скорости захвата позитронов вакансиями.

В настоящей работе развивается теория захвата позитрона на основе общей теории неравновесной квантовой статистики. Из первых принципов мы выводим кинетические уравнения, описывающие процесс захвата. Подробно анализируется влияние позитрон–фононного взаимодействия на температурную зависимость скорости захвата.

2. *Вывод кинетических уравнений*

Получим кинетические уравнения, описывающие процесс захвата. Гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}^{\mathrm{f}}_{\mathrm{pos}} + \mathscr{H}^{\mathrm{t}}_{\mathrm{pos}} + \mathscr{H}_{\mathrm{el}} + V + \mathscr{H}', \tag{2.1}$$

$$\mathscr{H}^{\mathrm{f}}_{\mathrm{pos}} = \sum_{\bar{p}} E_{\bar{p}} c^{+}_{\bar{p}} c_{\bar{p}}, \qquad \mathscr{H}^{\mathrm{t}}_{\mathrm{pos}} = \sum_{j} \varepsilon_j d^{+}_j d_j, \qquad \mathscr{H}_{\mathrm{el}} = \sum_{\bar{k}} \Omega_{\bar{k}} b^{+}_{\bar{k}} b_{\bar{k}},$$

$$V = \sum_{\bar{p}\bar{k}\bar{q}j} (M_{\bar{p}\bar{k}\bar{q}j} d^{+}_j b^{+}_{\bar{k}} b_{\bar{k}+\bar{q}} c_{\bar{p}} + M^{*}_{\bar{p}\bar{k}\bar{q}j} c^{+}_{\bar{p}} b^{+}_{\bar{k}+\bar{q}} b_{\bar{k}} d_j). \tag{2.2}$$

Здесь $\mathscr{H}^{\mathrm{f}}_{\mathrm{pos}}$, $\mathscr{H}^{\mathrm{t}}_{\mathrm{pos}}$, $\mathscr{H}_{\mathrm{el}}$, V — гамильтонианы свободных позитронов, захваченных дефектом позитронов, электронов проводимости и взаимодействия, ответственного за процесс захвата, соответственно; $c^{+}_{\bar{p}}$, d^{+}_j — соответственно операторы рождения свободного позитрона энергии $E_{\bar{p}}$ и захваченного позитрона в сотоянии $|j\rangle$ с энергией ε_j ($c_{\bar{p}}$, d_j — соответствующие операторы уничтожения); $b^{+}_{\bar{k}}$, $b_{\bar{k}}$ — операторы рождения и уничтожения электрона энергии $\Omega_{\bar{k}}$; $M_{\bar{p}\bar{k}\bar{q}j}$ — матричный элемент захвата. Через $\mathscr{H}'$ в (2.1) мы обозначили сумму гамильтонианов фононов и позитрон–фононного взаимодействия (сюда можно включить и другие взаимодействия, например, позитрон–электронное, электрон–фононное), явный вид которых нас пока не интересует.

Отметим, что запись гамильтониана V в виде (2.2) по аналогии с работой [13] означает, что процесс захвата позитрона сопровождается рождением электрон–дырочной пары (механизм Ходжеса [10]).

Для вывода кинетических уравнений, описывающих исследуемое явление, используем метод неравновесного статистического оператора Зубарева [15]. В соответствии с идеей метода предполагаем, что состояние системы вполне однозначно определяется заданием средних значений динамических переменных $P_1 = c^{+}_{\bar{p}} c_{\bar{p}}$, $P_2 = d^{+}_j d_j$, $P_3 = \mathscr{H}_{\mathrm{el}} + \mathscr{H}'$ и сопряженными им термодинамическими параметрами $\alpha_{\bar{p}}$, β_j, γ, имеющими смысл обратных температур свободных позитронов, захваченных позитронов и электрон–фононной подсистемы. Тогда кинетические уравнения с точностью до второго порядка по V можно представить в виде [15] (всюду считаем $\hbar = 1$)

$$\frac{\partial \langle P_k \rangle}{\partial t} = \int\limits_{-\infty}^{0} dt e^{\varepsilon t} \langle [V(t), [P_k, V]] \rangle, \qquad \varepsilon \to +0, \tag{2.3}$$

где $A(t)$ — оператор A в представлении Гейзенберга, $[A, B] = AB - BA$, а скобка $\langle \ldots \rangle$ означает усреднение с локально-равновесным оператором

$$\varrho_{\mathrm{L}} = Q^{-1} \exp\{-\sum_{\bar{p}} \alpha_{\bar{p}} E_{\bar{p}} c_{\bar{p}}^{+} c_{p} - \sum_{j} \beta_j \varepsilon_j d_j^{+} d_j - \gamma(\mathscr{H}_{\mathrm{el}} + \mathscr{H}')\}. \tag{2.4}$$

С учетом уравнения (2.3), явного вида V (2.2) и коммутационных соотношений между операторами можно получить

$$\frac{\partial \langle d_j^{+} d_j \rangle}{\partial t} = \int_{-\infty}^{0} dt e^{\varepsilon t} \sum_{\substack{\bar{p}\bar{k}\bar{q}i \\ \bar{p}'\bar{k}'\bar{q}'}} \{M_{\bar{p}\bar{k}\bar{q}j}^{*} M_{\bar{p}'\bar{k}'\bar{q}'i} \langle [c_{\bar{p}}^{+} b_{\bar{k}+\bar{q}}^{+} b_{\bar{k}} d_j,\, d_i^{+}(t) b_{\bar{k}'}^{+}(t) b_{\bar{k}'+\bar{q}'}(t) c_{\bar{p}'}(t)] \rangle$$
$$+ M_{\bar{p}'\bar{k}'\bar{q}'i}^{*} M_{\bar{p}\bar{k}\bar{q}j} \langle [c_{\bar{p}'}^{+}(t) b_{\bar{k}'+\bar{q}'}^{+}(t) b_{\bar{k}'}(t) d_i(t),\, d_j^{+} b_{\bar{k}}^{+} b_{\bar{k}+\bar{q}} c_{\bar{p}}] \rangle\}, \tag{2.5}$$

$$\frac{\partial \langle c_{\bar{p}}^{+} c_{\bar{p}} \rangle}{\partial t} = -\int_{-\infty}^{0} dt e^{\varepsilon t} \sum_{\substack{\bar{q}\bar{k}ji \\ \bar{p}'\bar{k}'\bar{q}'}} \{M_{\bar{p}\bar{k}\bar{q}j}^{*} M_{\bar{p}'\bar{k}'\bar{q}'i} \langle [c_{\bar{p}}^{+} b_{\bar{k}+\bar{q}}^{+} b_{\bar{k}} d_j,\, d_i^{+}(t) b_{\bar{k}'}^{+}(t) b_{\bar{k}'+\bar{q}'}(t) c_{\bar{p}'}(t)] \rangle$$
$$+ M_{\bar{p}'\bar{k}'\bar{q}'i}^{*} M_{\bar{p}\bar{k}\bar{q}j} \langle [c_{\bar{p}'}^{+}(t) b_{\bar{k}'+\bar{q}'}^{+}(t) b_{\bar{k}'}(t) d_i(t),\, d_j^{+} b_{\bar{k}}^{+} b_{\bar{k}+\bar{q}} c_{\bar{p}}] \rangle\}. \tag{2.6}$$

В правой части (2.5) и (2.6) мы опустили по два слагаемых, соответственно пропорциональных $c_{\bar{p}}^{+} c_{\bar{p}'}^{+}(t)$ и $c_{\bar{p}'} c_{\bar{p}}(t)$. Аналогичное уравнение можно написать и для электрон–фононной подсистемы. Однако с хорошей степенью точности можно считать, что эта подсистема постоянно находится в состоянии теплового равновесия с термостатом.

3. Приближение свободных электронов

Упростим правую часть уравнений (2.5) и (2.6). В принятом по V приближении при вычислении корреляционных функций, входящих в (2.5) и (2.6), электроны и захваченные дефектами позитроны можно считать свободными частицами, то есть не участвующими в каких-либо взаимодействиях. В этом случае имеем

$$b_{\bar{k}}^{+}(t) = b_{\bar{k}}^{+} e^{i\Omega_{\bar{k}} t}, \qquad b_{\bar{k}}(t) = b_{\bar{k}} e^{-i\Omega_{\bar{k}} t},$$
$$d_j^{+}(t) = d_j^{+} e^{i\varepsilon_j t}, \qquad d_j(t) = d_j e^{-i\varepsilon_j t}. \tag{3.1}$$

Принимая во внимание соотношение (3.1), выражения (2.5) и (2.6) удобно переписать в виде

$$\frac{\partial \langle d_j^{+} d_j \rangle}{\partial t} = \sum_{\bar{p}} [F_{\bar{p}j}(1 - \langle d_j^{+} d_j \rangle) \langle c_{\bar{p}}^{+} c_{\bar{p}} \rangle - \phi_{\bar{p}j} \langle d_j^{+} d_j \rangle (1 - \langle c_{\bar{p}}^{+} c_{\bar{p}} \rangle)], \tag{3.2}$$

$$\frac{\partial \langle c_{\bar{p}}^{+} c_{\bar{p}} \rangle}{\partial t} = -\sum_{j} [F_{\bar{p}j}(1 - \langle d_j^{+} d_j \rangle) \langle c_{\bar{p}}^{+} c_{\bar{p}} \rangle - \phi_{\bar{p}j} \langle d_j^{+} d_j \rangle (1 - \langle c_{\bar{p}}^{+} c_{\bar{p}} \rangle)], \tag{3.3}$$

где введены обозначения

$$F_{\bar{p}j} = \sum_{\bar{k}\bar{q}} |M_{\bar{p}\bar{k}\bar{q}j}|^2 \langle b^+_{\bar{k}+\bar{q}} b_{\bar{k}+\bar{q}} \rangle (1 - \langle b^+_{\bar{k}} b_{\bar{k}} \rangle) \int_{-\infty}^{0} dt e^{\varepsilon t} \left[\frac{\langle c^+_{\bar{p}} c_{\bar{p}}(t) \rangle}{\langle c^+_{\bar{p}} c_{\bar{p}} \rangle} e^{i(\varepsilon_j + \Omega_{\bar{k}} - \Omega_{\bar{k}+\bar{q}})t} \right.$$

$$\left. + \frac{\langle c^+_{\bar{p}}(t) c_{\bar{p}} \rangle}{\langle c^+_{\bar{p}} c_{\bar{p}} \rangle} e^{-i(\varepsilon_j + \Omega_{\bar{k}} - \Omega_{\bar{k}+\bar{q}})t} \right], \tag{3.4}$$

$$\phi_{\bar{p}j} = \sum_{\bar{k}\bar{q}} |M_{\bar{p}\bar{k}\bar{q}j}|^2 \langle b^+_{\bar{k}} b_{\bar{k}} \rangle (1 - \langle b^+_{\bar{k}+\bar{q}} b_{\bar{k}+\bar{q}} \rangle) \int_{-\infty}^{0} dt e^{\varepsilon t} \left[\frac{\langle c_{\bar{p}}(t) c^+_{\bar{p}} \rangle}{\langle c_{\bar{p}} c^+_{\bar{p}} \rangle} e^{i(\varepsilon_j + \Omega_{\bar{k}} - \Omega_{\bar{k}+\bar{q}})t} \right.$$

$$\left. + \frac{\langle c_{\bar{p}} c^+_{\bar{p}}(t) \rangle}{\langle c_{\bar{p}} c^+_{\bar{p}} \rangle} e^{-i(\varepsilon_j + \Omega_{\bar{k}} - \Omega_{\bar{k}+\bar{q}})t} \right]. \tag{3.5}$$

Процесс захвата позитрона в рассматриваемом случае описывается системой уравнений (3.2) и (3.3). Члены, пропорциональные $F_{\bar{p}j}$ и $\phi_{\bar{p}j}$ описывают захват свободного позитрона в связанное состояние и обратно соответственно. Если в правой части (3.2) и (3.3) положить $\langle d^+_j d_j \rangle = 0$, то эти уравнения по форме совпадут с феноменологическими уравнениями Брандта [16] (хотя в действительности за счет зацепления $F_{\bar{p}j}$ с $\langle c^+_{\bar{p}} c_{\bar{p}} \rangle$ мы имеем дело с бесконечной системой уравнений), лежащими в основе анализа процесса захвата позитрона в металлах. Однако мы имеем явные выражения для скорости захвата позитрона $F_{\bar{p}j}$ (3.4) из состояния с энергией $E_{\bar{p}}$ в состояние $|j\rangle$. В приближении свободных позитронов, то есть при выполнении соотношений

$$c^+_{\bar{p}}(t) = c^+_{\bar{p}} e^{iE_{\bar{p}}t}, \qquad c_{\bar{p}}(t) = c_{\bar{p}} e^{-iE_{\bar{p}}t}, \tag{3.6}$$

выражение (3.4) переходит в хорошо известный результат [10]. В этом случае скорость захвата практически не зависит от температуры.

4. *Учет позитрон–фононного взаимодействия*

Исследуем влияние позитрон–фононного взаимодействия

$$\mathscr{H}_{\text{pos-ph}} = \sum_{\bar{q}\bar{k}} g_{\bar{q}} c^+_{\bar{k}+\bar{q}} c_{\bar{k}} (a_{\bar{q}} + a^+_{-\bar{q}}) \tag{4.1}$$

на процесс захвата. В (4.1) $a^+_{\bar{q}}$, $a_{\bar{q}}$ — операторы рождения и уничтожения фонона частоты $\omega_{\bar{q}}$, а $g_{\bar{q}}$ — константа, характеризующая величину взаимодействия. В данном случае соотношение (3.6) для операторов $c^+_{\bar{p}}(t)$ и $c_{\bar{p}}(t)$ не имеет места. Задача фактически заключается в вычислении корреляционных функций $\langle c^+_{\bar{p}}(t) c_{\bar{p}} \rangle$ и $\langle c_{\bar{p}}(t) c^+_{\bar{p}} \rangle$, входящих в (3.4) и (3.5), для системы описываемой гамильтонианом

$$\tilde{\mathscr{H}} = \sum_{\bar{p}} E_{\bar{p}} c^+_{\bar{p}} c_{\bar{p}} + \sum_{\bar{q}} \omega_{\bar{q}} a^+_{\bar{q}} a_{\bar{q}} + \mathscr{H}_{\text{pos-ph}}, \tag{4.2}$$

где второе слагаемое представляет собой энергию фононов. При вычислении указанных функций можно считать, что позитроны находятся в состоянии равновесия с фононами.

Для проведения вычислений удобно воспользоваться операторным разложением Дайсона по степеням $\mathscr{H}_{\text{pos-ph}}$ [17]

$$c_{\bar{p}}^{+}(t) = e^{i\mathscr{H}_0 t} c_{\bar{p}}^{+} e^{-i\mathscr{H}_0 t} - i e^{i\mathscr{H}_0 t} \int_0^{-t} dt' [\mathscr{H}_{\text{pos-ph}}(t'), c_{\bar{p}}^{+}] e^{-i\mathscr{H}_0 t}$$

$$- e^{i\mathscr{H}_0 t} \int_0^{-t} dt' \int_0^{t'} dt'' [\mathscr{H}_{\text{pos-ph}}(t'), [\mathscr{H}_{\text{pos-ph}}(t''), c_{\bar{p}}^{+}]] e^{-i\mathscr{H}_0 t} + \ldots, \tag{4.3}$$

где

$$\mathscr{H}_{\text{pos-ph}}(t) = e^{i\mathscr{H}_0 t} \mathscr{H}_{\text{pos-ph}} e^{-i\mathscr{H}_0 t},$$

а через $\mathscr{H}_0$ обозначена сумма первых двух слагаемых в $\tilde{\mathscr{H}}$ (4.2). Из (4.3) непосредственно следует соответствующее разложение для корреляционной функции $\langle c_{\bar{p}}^{+}(t) c_{\bar{p}} \rangle$. Принимая во внимание (4.3) и то обстоятельство, что

$$\mathscr{H}_{\text{pos-ph}}(t) = \sum_{\bar{q}\bar{k}} g_{\bar{q}} e^{i(E_{\bar{k}+\bar{q}} - E_{\bar{k}})t} c_{\bar{k}+\bar{q}}^{+} c_{\bar{k}} (a_{\bar{q}} e^{-i\omega_{\bar{q}} t} + a_{-\bar{q}}^{+} e^{i\omega_{\bar{q}} t}),$$

после несколько громоздкого расчета можно получить

$$\langle c_{\bar{p}}^{+}(t) c_{\bar{p}} \rangle = \langle c_{\bar{p}}^{+} c_{\bar{p}} \rangle e^{iE_{\bar{p}} t} \Bigg\{ 1 - \sum_{q} g_{\bar{q}}^{2} \Bigg(\langle a_{\bar{q}}^{+} a_{\bar{q}} \rangle \Bigg[\frac{1}{(\omega_{\bar{q}} - E_{\bar{p}} + E_{\bar{p}+\bar{q}})^2}$$

$$- \frac{t}{i(\omega_{\bar{q}} - E_{\bar{p}} + E_{\bar{p}+\bar{q}})} - \frac{e^{i(\omega_{\bar{q}} - E_{\bar{p}} + E_{\bar{p}+\bar{q}})t}}{(\omega_{\bar{q}} - E_{\bar{p}} + E_{\bar{p}+\bar{q}})^2} \Bigg] + \langle a_{\bar{q}} a_{\bar{q}}^{+} \rangle \Bigg[\frac{1}{(\omega_{\bar{q}} + E_{\bar{p}} - E_{\bar{p}+\bar{q}})^2}$$

$$+ \frac{t}{i(\omega_{\bar{q}} + E_{\bar{p}} - E_{\bar{p}+\bar{q}})} - \frac{e^{-i(\omega_{\bar{q}} + E_{\bar{p}} - E_{\bar{p}+\bar{q}})t}}{(\omega_{\bar{q}} + E_{\bar{p}} - E_{\bar{p}+\bar{q}})^2} \Bigg] + \langle c_{\bar{p}+\bar{q}} c_{\bar{p}+\bar{q}}^{+} \rangle \Bigg[\frac{4\omega_{\bar{q}} (E_{\bar{p}} - E_{\bar{p}+\bar{q}})}{[\omega_{\bar{q}}^{2} - (E_{\bar{p}} - E_{\bar{p}+\bar{q}})^2]^2}$$

$$+ \frac{2i\omega_{\bar{q}} t}{\omega_{\bar{q}}^{2} - (E_{\bar{p}} - E_{\bar{p}+\bar{q}})^2} - \frac{e^{i(\omega_{\bar{q}} - E_{\bar{p}} + E_{\bar{p}+\bar{q}})t}}{(\omega_{\bar{q}} - E_{\bar{p}} + E_{\bar{p}+\bar{q}})^2} + \frac{e^{-i(\omega_{\bar{q}} + E_{\bar{p}} - E_{\bar{p}+\bar{q}})t}}{(\omega_{\bar{q}} + E_{\bar{p}} - E_{\bar{p}+\bar{q}})^2} \Bigg] \Bigg) \Bigg\}. \tag{4.4}$$

Аналогичным образом можно получить выражение для $\langle c_{\bar{p}}(t) c_{\bar{p}}^{+} \rangle$. Корреляционные функции $\langle c_{\bar{p}}^{+} c_{\bar{p}}(t) \rangle$ и $\langle c_{\bar{p}} c_{\bar{p}}^{+}(t) \rangle$ легко получить, используя соотношение $\langle A(t)B \rangle = \langle AB(-t) \rangle$, которое выполняется для произвольных операторов A и B [15].

Кинетический коэффициент $F_{\bar{p}j}$ (3.4), характеризующий скорость захвата позитрона, при наличии позитрон–фононного взаимодействия принимает вид

$$F_{\bar{p}j} = F_{\bar{p}j}^{(0)} + F_{\bar{p}j}^{(1)}, \tag{4.5}$$

где

$$F_{\bar{p}j}^{(0)} = 2\pi \Bigg(1 - 2 \sum_{\bar{q}'} g_{\bar{q}'}^{2} n_{\bar{q}'} \frac{\omega_{\bar{q}'}^{2} + (E_{\bar{p}} - E_{\bar{p}+\bar{q}'})^2}{[\omega_{\bar{q}'}^{2} - (E_{\bar{p}} - E_{\bar{p}+\bar{q}'})^2]^2} \Bigg) \sum_{\bar{k}\bar{q}} |M_{\bar{p}\bar{k}\bar{q}j}|^2 \langle b_{\bar{k}+\bar{q}}^{+} b_{\bar{k}+\bar{q}} \rangle (1$$

$$- \langle b_{\bar{k}}^{+} b_{\bar{k}} \rangle) \delta(\varepsilon_j - E_{\bar{p}} + \Omega_{\bar{k}} - \Omega_{\bar{k}+\bar{q}}), \tag{4.6}$$

$$F_{\bar{p}j}^{(1)} = 2\pi \sum_{\bar{k}\bar{q}} |M_{\bar{q}k\bar{q}j}|^2 \frac{\langle b_{\bar{k}+\bar{q}}^{+} b_{\bar{k}+\bar{q}} \rangle (1 - \langle b_{\bar{k}}^{+} k_{\bar{k}} \rangle)}{(\varepsilon_j - E_{\bar{p}} + \Omega_{\bar{k}} - \Omega_{\bar{k}+\bar{q}})^2} \sum_{q'} g_{\bar{q}'}^2 n_{\bar{q}'} [\delta(\varepsilon_j - E_{\bar{p}+\bar{q}'}$$

$$+ \Omega_{\bar{k}} - \Omega_{\bar{k}+\bar{q}} - \omega_{\bar{q}'}) + \delta(\varepsilon_j - E_{\bar{p}+\bar{q}'} + \Omega_{\bar{k}} - \Omega_{\bar{k}+\bar{q}} + \omega_{\bar{q}'})]. \qquad (4.7)$$

Выражения (4.6) и (4.7) записаны для случая, когда число фононов $n_{\bar{q}} = \langle a_{\bar{q}}^{+} a_{\bar{q}} \rangle$ значительно больше единицы (высокотемпературное приближение). В этом случае в корреляционных функциях типа (4.9) заведомо можно пренебречь членами, пропорциональными $\langle c_{\bar{p}+\bar{q}} c_{\bar{p}+\bar{q}}^{+} \rangle$, что приводит к существенному упрощению конечных результатов (4.6) и (4.7). Выражение для $\phi_{\bar{p}j}$, аналогичное (4.5) и характеризующее скорость ускользания позитрона из захваченного состояния мы не приводим.

5. Температурная зависимость скорости захвата

Исследуем полученные результаты. Выражение $F_{\bar{p}j}^{(0)}$ (4.6) дает вероятность захвата позитрона с рождением электрон–дырочной пары при наличии позитрон–фононного взаимодействия. В данном случае, как следует из (4.6), позитрон–фононное взаимодействие уменьшает величину скорости захвата. Однако при наличии позитрон–фононного взаимодействия становятся возможными процессы захвата как с рождением электрон–дырочной пары, так и с рождением или уничтожением фононов. Скорость захвата в случае таких однофононных процессов дается формулой (4.7). По существу, это новый механизм захвата по отношению к механизму, предложенному Ходжесом [10]. Естественно, что он приводит к увеличению эффективности захвата. К сожалению, корректная численная оценка относительной эффективности данного механизма и механизма захвата Ходжеса не представляется возможной. Однако новый механизм в отличие от ходжесовского приводит к температурной зависимости скорости захвата, что очень важно с точки зрения эксперимента.

Рассмотрим температурную зависимость скорости захвата. На практике представляют интерес высокие температуры, когда велика концентрация вакансий, в частности, температуры выше дебаевской (для Al, например, $\theta = 428$ K, а температура плавления — 933 K). Принимая во внимание явный вид $n_{\bar{q}}$, из (4.6) и (4.7) легко заметить, что при $T > \theta$ вероятность захвата является линейной по температуре функцией.

Таким образом, в общем виде можно записать $F = a + bT$, где параметр a характеризует величину ходжесовской скорости захвата, а b — температурно зависящей части полной скорости захвата. Поскольку оценка величин a и b затруднена, то наиболее разумно определить их из эксперимента. Из физических же соображений следует ожидать увеличения скорости захвата с ростом температуры. Дело в том, что участие фононов существенно увеличивает число возможных способов реализации захвата позитрона вакансией (в аналогичном соотношении находятся рамановские и прямые процессы в электронной спин-решеточной релаксации).

Отметим, что многофононные процессы, по-видимому, малоэффективны, поскольку являются процессами высшего порядка. То обстоятельство, что в этом случае могут участвовать фононы всего спектра несущественно, так как даже в однофононных процессах благодаря возбуждению электрон–дырочной пары в процессе захвата участвуют фононы всего спектра.

Если принять

$$\langle c_{\bar{p}}^{+}(t) c_{\bar{p}} \rangle = \langle c_{\bar{p}}^{+} c_{\bar{p}} \rangle e^{iE_{\bar{p}}t} e^{-\frac{|t|}{\tau}},$$

где τ — параметр, характеризующий скорость затухания корреляционной функции, то для коэффициента $F_{\bar{p}j}$ (3.4) имеем

$$F_{\bar{p}j} = 2 \sum_{\bar{k}\bar{q}} |M_{\bar{p}\bar{k}\bar{q}j}|^2 \langle b_{\bar{k}+\bar{q}}^{+} b_{\bar{k}+\bar{q}} \rangle (1 - \langle b_{\bar{k}}^{+} b_{k} \rangle) \frac{\tau}{1 + (\varepsilon_j - E_{\bar{p}} + \Omega_{\bar{k}} - \Omega_{\bar{k}+\bar{q}})^2 \tau^2}. \tag{5.1}$$

При $(\varepsilon_j - E_{\bar{p}} + \Omega_{\bar{k}} - \Omega_{\bar{k}+\bar{q}})^2 \tau^2 \gg 1$ выражение (5.1) совпадает с (4.7) при условии, что

$$\tau^{-1} = \pi \sum_{\bar{q}'} g_{\bar{q}'}^2 n_{\bar{q}'} (\delta(\varepsilon_j - E_{\bar{p}+\bar{q}'} + \Omega_{\bar{k}} - \Omega_{\bar{k}+\bar{q}} - \omega_{\bar{q}'})$$

$$+ \delta(\varepsilon_j - E_{\bar{p}+\bar{q}'} + \Omega_{\bar{k}} - \Omega_{\bar{k}+\bar{q}} + \omega_{\bar{q}'})). \tag{5.2}$$

Формулу (5.1) с τ (5.2) разумно рассматривать, как обобщение результата (4.7) на произвольную величину позитрон–фононного взаимодействия.

В заключение следует особо подчеркнуть, что выражения (2.5) и (2.6) удобны в качестве отправных выражений для исследования влияния различных взаимодействий на процесс захвата. Очевидно, что учет электрон-фононного взаимодействия должен привести к дополнительному вкладу в скорость захвата, причем линейному по температуре при $T > \theta$. В настоящем расчете мы не учитывали возможность аннигиляции позитрона в процессе захвата. Этот недостаток можно устранить, феноменологически введя в правые части уравнений (2.5) и (2.6) члены $-\lambda \langle d_j^{+} d_j \rangle$ с $-\gamma \langle c_{\bar{p}}^{+} c_{\bar{p}} \rangle$, описывающие аннигиляцию позитрона из связанного состояния со скоростью λ и из свободного — со скоростью γ. Для детального описания процесса захвата в этом случае необходимо решить систему уравнений (2.5) и (2.6).

ЛИТЕРАТУРА

[1] B. T. A. McKee, W. Triftshauser, A. T. Stewart, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 358 (1972).

[2] B. T. A. McKee, H. C. Jamieson, A. T. Stewart, *Phys. Rev. Lett.* **31**, 634 (1973).

[3] A. Seeger, *J. Phys. F* **3**, 248 (1973).

[4] R. M. J. Cotterill, K. Detersen, G. Trumpy, J. Traff, *J. Phys. F* **2**, 459 (1972).

[5] P. Hautojarvi, *Solid State Commun.* **11**, 1049 (1972).

[6] Ch. Dauwe, D. Segers, L. Dorikens-Vanpraet, M. Dorikens, *Phys. Status Solidi* (a) **17**, 443 (1973).

[7] D. C. Connors, R. N. West, *Phys. Lett.* **30A**, 24 (1969).

[8] A. Seeger, *Phys. Lett.* **40A**, 135 (1972).

[9] W. Brandt, *Appl. Phys.* **5**, 1 (1974).

[10] C. H. Hodges, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 284 (1970).
[11] B. Bergersen, D. W. Taylor, *Can. J. Phys.* **52**, 1594 (1974).
[12] T. McMullen, B. Hede, *J. Phys. F* **5**, 669 (1975).
[13] T. McMullen, *J. Phys. F* **7**, 2041 (1977).
[14] T. McMullen, *J. Phys. F* **8**, 87 (1978).
[15] Д. Н. Зубарев, *Неравновесная статистическая термодинамика*, Наука, Москва **1971**.
[16] W. Brandt, in *Positron Annihilation*, ed. by A. T. Stewart and L. O. Roelling, Academic Press, New York 1967, p. 155.
17] W. A. B. Evans, J. G. Powles, *Phys. Lett.* **24A**, 218 (1967).