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. Бондаренко Г.Г. М.: ГНУ «НИИ ПМТ», 2008 г., С.679-709. <u>http://www.niipmt.ru/index.php?p=6</u> <u>http://www.niipmt.ru/index.php?p=61</u>

### УДК 539.124.6: 621.315.592

## ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ АТОМА ПОЗИТРОНИЯ В КРИСТАЛЛАХ

## <sup>1,2</sup>Е.П.Светлов-Прокопьев

<sup>1</sup>Московский институт электронной техники (Технический университет) (124498 Москва, г.Зеленоград, проезд 4806, д.5 E-mail: <u>epprokopiev@mail.ru</u>)

Исследованы свойства атома позитрония в кристаллах в рамках моделей Френкеля и Ванье-Мотта., позволяющие правильным образом объяснять аномалии аннигиляции позитронов в различных веществах.

Атом позитрония (*Ps*) в кристаллах вносит заметный вклад в процесс аннигиляции позитронов [1], причем *Ps* малого радиуса. Ниже исследуются свойства *Ps* малого радиуса в рамках моделей Френкеля [2-4] и Ванье-Мотта [5-7.

#### §1. Гамильтониан системы и волновые функции

В адиабатическом приближении Борна-Оппенгеймера гамильтониан системы *Ps* + кристалл может быть записан в виде

$$H_{0} = -\sum_{i} \frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla_{i}^{2} + \sum_{i} U(\vec{r}_{i}) + \sum_{i < j} \frac{e^{2}}{|\vec{r}_{i} - \vec{r}_{j}|} - \frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla_{-}^{2} + U_{-}(\vec{r}_{-}) + \sum_{i} \frac{e^{2}}{|\vec{r} - \vec{r}_{i}|} - \frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla_{+}^{2} + U_{+}(\vec{r}_{+}) - \sum_{i} \frac{e^{2}}{|\vec{r}_{+} - \vec{r}_{i}|} - \frac{e^{2}}{|\vec{r}_{+} - \vec{r}_{-}|} + H_{s}$$

$$(1)$$

Первый член гамильтониана описывает кинетическую энергию электронов

кристалла, второй член – взаимодействие ядер с электронами, третий член – взаимодействие электронов кристалла между собой, четвертый и шестой – кинетическую энергию электрона и позитрона, входящих в состав *Ps*, пятый и

восьмой члены – взаимодействие электрона и позитрона *Ps* с ядрами, шестой и девятый члены - – взаимодействие электрона и позитрона *Ps* с электронами кристалла, десятый член отвечает кулоновскому взаимодействию между электроном и позитроном. В оператор *H<sub>s</sub>* включены все слагаемые, зависящие от спинов электронов и позитрона.

Чтобы выяснить четче физический смысл нашей задачи, применим одноэлектронное приближение. Это означает, что решение уравнения

$$H\varphi(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2},..\vec{r}_{-},\vec{r}_{+}) = E\varphi(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2},..\vec{r}_{-},\vec{r}_{+})$$
(2)

можно представить в виде антисимметризованных произведений ортонормированных одноэлектронных  $\varphi$  и однопозитронной волновых функций

$$\Phi = \chi_{\alpha}(\vec{r}_{+})A\varphi_{1}(\vec{r}_{1}),\varphi_{2}(\vec{r}_{2})...\varphi_{n+1}(\vec{r}_{-}),$$
(3)

где  $A = [(n+1)!]^{-1/2} \sum_{p} (-1)^{\nu} P, (n+1) -$  полное число электронов, P - одна из (n+1)! перестановок,  $\nu -$  четность такой перестановки.

Для простоты, как и в [5], рассмотрим моноатомный кристалл с двумя валентными электронами и *N* ионными остовами. В этом случае волновая функция системы *Ps* + кристалл запишется в виде

$$\Phi_0 = \chi_\alpha(\vec{r}_+) A \varphi_{1\alpha}(\vec{r}_1), \varphi_{1\beta}(\vec{r}_2) \dots \varphi_{N\beta}(\vec{r}) \varphi_\alpha(\vec{r}_-)$$
(4)

Здесь  $\alpha$  и  $\beta$  - спиновые квантовые числа ( $m_s = +1/2$  и  $m_s = -1/2$ ), а векторы  $\vec{r}_i$  включают в себя спиновые переменные. Одноэлектронные и однопозитронную волновые функции представим в виде

$$\varphi_{ia}(\vec{r}_i) = \varphi_i(x, y, z)\chi_{1/2}(\sigma); \chi_a(\vec{r}_+) = \chi(x, y, z)\chi_{1/2}(\sigma)$$
(5)

Энергия системы *Ps* + кристалл, вычисленная на волновых функциях (5), будет равна

$$\begin{split} E_{0}^{(1)} &= (\Phi, H_{0}\Phi_{0}) = \sum_{i} \sum_{\sigma} \int \varphi_{i\sigma}^{*}(\vec{r}) \left[ -\frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla^{2} + U(\vec{r}) \right] \varphi_{i\sigma}(\vec{r}) d\tau + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i} \sum_{\sigma} \sum_{j} \sum_{\sigma'} \left( \iint \varphi_{i\sigma}^{*}(\vec{r}_{1}) \varphi_{i\sigma'}^{*}(\vec{r}_{2}) g_{12} \varphi_{i\sigma}(\vec{r}_{1}) \varphi_{j\sigma'}(\vec{r}_{2}) d\tau_{1} d\tau_{2} - \\ &- \iint \varphi_{i\sigma}^{*}(\vec{r}_{1}) \varphi_{i\sigma'}^{*}(\vec{r}_{2}) g_{12} \varphi_{i\sigma'}(\vec{r}_{1}) \varphi_{i\sigma'}(\vec{r}_{2}) d\tau_{1} d\tau_{2} \right) + \sum_{\sigma} \int \varphi_{\sigma}^{*}(\vec{r}_{-}) \left[ -\frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla^{2} + U(\vec{r}_{-}) \right] \varphi_{\sigma}(\vec{r}_{-}) d\tau + \\ &+ \sum_{i} \sum_{\sigma} \left( \iint \varphi_{i\sigma}^{*}(\vec{r}_{1}) \varphi_{\sigma'}^{*}(\vec{r}_{-}) g_{12} \varphi_{i\sigma}(\vec{r}_{1}) \varphi_{\sigma'}(\vec{r}_{-}) d\tau_{1} d\tau_{2} - \iint \varphi_{i\sigma}^{*}(\vec{r}_{1}) \varphi_{\sigma'}^{*}(\vec{r}_{-}) g_{12} \varphi_{i\sigma}(\vec{r}_{1}) \varphi_{\sigma'}(\vec{r}_{-}) d\tau_{1} d\tau_{2} - \iint \varphi_{i\sigma}^{*}(\vec{r}_{1}) \varphi_{i\sigma'}(\vec{r}_{1}) g_{i\sigma'}(\vec{r}_{-}) d\tau_{1} d\tau_{2} \right] \\ &+ \sum_{\sigma} \int \chi_{\sigma}^{*}(\vec{r}_{+}) \left[ -\frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla^{2} + U(\vec{r}_{+}) \right] \chi_{\sigma}(\vec{r}_{+}) d\tau - \sum_{i} \sum_{\sigma} \left( \iint \varphi_{i\sigma}^{*}(\vec{r}_{1}) \chi_{\sigma'}^{*}(\vec{r}_{+}) g_{12} \varphi_{i\sigma}(\vec{r}_{1}) d\tau_{1} d\tau_{2} - \\ &- \sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} \iint \chi_{\sigma}^{*}(\vec{r}_{+}) \chi_{\sigma}(\vec{r}_{+}) g_{12} \varphi_{\sigma'}^{*}(\vec{r}_{-}) \varphi_{\sigma'}(\vec{r}_{-}) d\tau_{-} d\tau_{+} \right] \\ &= E_{0}^{cr} + E_{0}^{-} + E_{0}^{+} + E_{0}^{+-} \\ \end{aligned}$$

Здесь

$$g_{12} = \frac{e^2}{|\vec{r}_{\pm} - \vec{r}_i|}; g_{12} = \frac{e^2}{|\vec{r}_{-} - \vec{r}_{+}|}; g_{12} = \frac{e^2}{|\vec{r}_{1} - \vec{r}_{2}|}$$
(7)

В выражении (6) суммирование проводится по их возможным значениям: 1/2 и – 1/2.

Выражение (6) для электронов и позитрона в кристалле с заполненными валентными оболочками принимает вид

$$E_{0}^{(1)} = (\Phi, H_{0}\Phi_{0}) = E_{0}^{cr} + \sum_{\sigma} \int \varphi_{\sigma}^{*}(\vec{r}_{-}) \left[ -\frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla^{2} + U(\vec{r}_{-}) \right] \varphi_{\sigma}(\vec{r}_{-}) d\tau_{-} + \\ + \sum_{i} \sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} (\iint \varphi_{i\sigma}^{*}(\vec{r}_{1}) \varphi_{\sigma'}^{*}(\vec{r}_{-}) g_{12} \varphi_{i\sigma}(\vec{r}_{1}) \varphi_{j\sigma'}(\vec{r}_{-}) d\tau_{1} d\tau_{-} - \\ - \iint \varphi_{i\sigma}^{*}(\vec{r}_{1}) \varphi_{\sigma'}^{*}(\vec{r}_{-}) g_{12} \varphi_{i\sigma'}(\vec{r}_{1}) \varphi_{i\sigma'}(\vec{r}_{-}) d\tau_{1} d\tau_{-} \right) + \\ + \sum_{\sigma} \int \chi_{\sigma}^{*}(\vec{r}_{+}) \left[ -\frac{\hbar^{2}}{2m} \nabla^{2} + U(\vec{r}_{+}) \right] \chi_{\sigma}(\vec{r}_{+}) d\tau_{+} - \\ - \sum_{i} \sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} (\iint \varphi_{i\sigma}^{*}(\vec{r}_{1}) \varphi_{i\sigma}(\vec{r}_{1}) g_{12} \chi_{\sigma'}^{*}(\vec{r}_{+}) \chi_{\sigma'}(\vec{r}_{+}) d\tau_{1} d\tau_{+} - \\ - \sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} \iint \chi_{\sigma}^{*}(\vec{r}_{+}) \chi_{\sigma}(\vec{r}_{+}) g_{12} \varphi_{\sigma'}^{*}(\vec{r}_{-}) \varphi_{\sigma'}(\vec{r}_{-}) d\tau_{-} d\tau_{+} \right)$$
(8)

Рассмотрим два случая функций  $\varphi_i$  и  $\chi$  в хартри-фоковском приближении: блоховские функции  $\varphi_i \equiv \psi_{n\vec{k}_-}$  и  $\chi \equiv \chi_{\vec{k}_+}$  (*n* индекс зоны,  $\vec{k}_-(\vec{k}_{-1},...\vec{k}_{-N},\vec{k}_-)$  - один из волновых векторов зоны Бриллюэна) и функций сильной связи  $\varphi_i \equiv \varphi_{l\vec{k}_-}, \chi \equiv \chi_{l\vec{R}}$ .

В первом случае функции  $\psi_{n\vec{k}_{-}}$  и  $\chi_{\vec{k}_{+}}$  являются решениями уравнений

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}_{-})\right]\psi_{n\vec{k}_{-}} = \varepsilon_{n\vec{k}_{-}}\psi_{n\vec{k}_{-}}$$
(9a)

$$\left[-\frac{\hbar^{2}}{2m}\nabla^{2} + V(\vec{r}_{+})\right]\chi_{l\vec{k}_{-}} = \varepsilon_{l\vec{k}_{-}}\chi_{l\vec{k}_{-}}$$
(96)

Здесь  $V(\vec{r}_{-})$  и  $V(\vec{r}_{+})$  - самосогласованные периодические потенциалы.

С учетом (9) уравнение (8) несколько упрощается

$$E_{0}^{(1)} - E_{0}^{cr} = (\Phi, H_{0}\Phi_{0}) = 2\sum_{\vec{k}_{-}} [\varepsilon_{n\vec{k}_{-}} + \int \psi_{n\vec{k}_{-}}^{*}(\vec{r}_{-})(U_{-} - V_{-})\psi_{n\vec{k}_{-}}(\vec{r})d\vec{r}] + \\ + \sum_{\vec{k}_{-}} \sum_{\sigma} \sum_{n\vec{k}_{-}} \sum_{\sigma'} (\int \psi_{m\vec{k}_{-}\sigma}^{*}(\vec{r}_{1})\psi_{n\vec{k}_{-}\sigma'}(\vec{r}_{-})g_{12}\psi_{m\vec{k}_{-}\sigma'}(\vec{r}_{1})\psi_{n\vec{k}_{-}\sigma}(\vec{r}_{-})d\tau_{1}d\tau_{-} - \\ - \int \psi_{m\vec{k}_{-}\sigma}^{*}(\vec{r}_{1})\psi_{n\vec{k}_{-}\sigma'}(\vec{r}_{-})g_{12}\psi_{m\vec{k}_{-}\sigma'}(\vec{r}_{1})\psi_{n\vec{k}_{-}\sigma}(\vec{r}_{-})d\tau_{1}d\tau_{-}) + \\ + 2\sum_{\vec{k}_{+}} [\varepsilon_{l\vec{k}_{+}} + \int \chi_{l\vec{k}_{+}}(\vec{r})(U_{+} - V_{+})\chi_{l\vec{k}_{+}}(\vec{r})d\vec{r}] - \\ - \sum_{\vec{k}_{-}} \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}_{+}} \sum_{\sigma'} (\int \psi_{m\vec{k}_{-}\sigma}^{*}(\vec{r}_{1})\psi_{m\vec{k}_{-}\sigma}(\vec{r}_{1})g_{12}\chi_{\vec{k}_{+}\sigma'}^{*}(\vec{r}_{+})\chi_{\vec{k}_{+}\sigma'}(\vec{r}_{+})d\tau_{1}d\tau_{+}) - \\ - \sum_{\vec{k}_{+}} \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}_{-}} \sum_{\sigma'} (\int \chi_{l\vec{k}_{+}\sigma}^{*}(\vec{r}_{+})\chi_{l\vec{k}_{+}\sigma}(\vec{r}_{1})g_{12}\psi_{n\vec{k}_{-}\sigma}^{*}(\vec{r}_{-})\psi_{n\vec{k}_{-}\sigma}(\vec{r}_{-})d\tau_{-}d\tau_{+})$$
(10)

Здесь индексы *m*, *n*, *l* относятся к заполненной валентной зоне, электронной и позитронной зонам проводимости. Отметим, что позитронная зона инвертирована отношению электронной проводимости по к зоне проводимости. Заметим также, что в обычной схеме Блоха без учета взаимодействия энергия равнялась бы:  $2\sum_{\vec{k}_{-}} \varepsilon_{n\vec{k}_{-}}$  и  $2\sum_{\vec{k}_{+}} \varepsilon_{l\vec{k}_{+}}$ .

В приближении сильной связи функции  $\varphi_{i\bar{R}}$  являются решениями уравнения Шредингера для изолированного атома

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r}_i - R)\right]\varphi_{m\vec{R}} = \varepsilon_m \varphi_{m\vec{R}}, \qquad (11)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U_{-}(\vec{r}_{-} - R)\right]\varphi_{n\vec{R}} = \varepsilon_n \varphi_{n\vec{R}}, \qquad (12)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U_+(\vec{r}_+ - R)\right]\varphi_{l\bar{R}} = \varepsilon_l \varphi_{l\bar{R}}, \qquad (13)$$

Уравнения (11), (12), (13) соответствуют решениям для электронов кристалла, электрона и позитрона, образующих атом *Ps*. Здесь  $U(\vec{r}_i - \vec{R})$  - потенциал, создаваемый остовом атома или атомом, центр которого расположен в точке с радиусом-вектором  $\vec{R}$ ,

Теперь, используя функции  $\varphi_{i\bar{R}}$ , для  $E_0^{(1)} - E_0^{cr}$  получаем уравнение, аналогичное (6) и (10)

$$E_{0}^{(1)} = 2\sum_{\vec{k}_{-}} \left[ \mathcal{E}_{m_{-}} + \int \varphi_{m\vec{k}_{-}}^{*} (U - \sum_{\vec{k}'} U(\vec{r} - \vec{R}') \varphi_{m\vec{k}} d\vec{r} \right] + \\ + \sum_{\vec{k}} \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}'} \sum_{\sigma'} \left( \int \varphi_{m\vec{k}\sigma}^{*}(\vec{r}_{1}) \psi_{m\vec{k}\sigma'}^{*}(\vec{r}_{2}) g_{12} \varphi_{m\vec{k}\sigma}(\vec{r}_{1}) \varphi_{m\vec{k}\sigma'}(\vec{r}_{2}) d\tau_{1} d\tau_{2} - \\ - \int \varphi_{m\vec{k}\sigma}^{*}(\vec{r}_{1}) \psi_{m\vec{k}'\sigma'}^{*}(\vec{r}_{2}) g_{12} \varphi_{m\vec{k}'\sigma'}(\vec{r}_{1}) \varphi_{m\vec{k}\sigma}(\vec{r}_{2}) d\tau_{1} d\tau_{2} \right) + \\ + 2\sum_{\vec{k}_{-}} \left[ \mathcal{E}_{n_{-}} + \int \varphi_{n\vec{k}_{-}}^{*} (U_{-} - \sum_{\vec{k}'} U_{-}(\vec{r} - \vec{R}') \varphi_{n\vec{k}} d\vec{r} \right] + \\ + \sum_{\vec{k}_{-}} \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}'_{-}} \sum_{\sigma'} \left( \int \varphi_{n\vec{k}\sigma}^{*}(\vec{r}_{1}) \psi_{n\vec{k}'\sigma'}(\vec{r}_{2}) g_{12} \varphi_{n\vec{k}\sigma}(\vec{r}_{1}) \varphi_{n\vec{k}'\sigma'}(\vec{r}_{2}) d\tau_{1} d\tau_{2} - \\ - \int \varphi_{n\vec{k}\sigma}^{*}(\vec{r}_{1}) \psi_{n\vec{k}'\sigma'}^{*}(\vec{r}_{2}) g_{12} \varphi_{n\vec{k}'\sigma'}(\vec{r}_{1}) \varphi_{n\vec{k}\sigma}(\vec{r}_{2}) d\tau_{1} d\tau_{2} \right) + \\ + 2\sum_{\vec{k}_{-}} \left[ \mathcal{E}_{I} + \int \varphi_{l\vec{k}}(\vec{r}) (U_{+} - \sum_{\vec{k}'} U_{+}(\vec{r} - \vec{R}') \varphi_{l\vec{k}}(\vec{r}) d\vec{r} \right] - \\ - \sum_{\vec{k}_{-}} \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}_{+}'} \sum_{\sigma'} \left( \int \varphi_{l\vec{k}\sigma}^{*}(\vec{r}_{1}) \varphi_{l\vec{k}\sigma}(\vec{r}_{2}) g_{12} \varphi_{n\vec{k}'\sigma'}^{*}(\vec{r}_{1}) \varphi_{n\vec{k}'\sigma'}(\vec{r}_{2}) d\tau_{1} d\tau_{2} \right) -$$

$$(14)$$

Анализ равнения типа (14) дан в [5]. Поэтому

$$E_{0}^{(1)} - E_{0}^{cr} = 2\sum_{\vec{k}} [\varepsilon_{n_{-}} + \int \varphi_{n\vec{k}_{-}}^{*} (U_{-} - \sum_{\vec{k}'} U_{-}(\vec{r} - \vec{k}') \varphi_{n\vec{k}} d\vec{r}] + \\ + \sum_{\vec{k}} \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}'} \sum_{\sigma'} (\int \varphi_{n\vec{k}\sigma}^{*}(\vec{r}_{1}) \psi_{n\vec{k}'\sigma'}^{*}(\vec{r}_{2}) g_{12} \varphi_{n\vec{k}\sigma}(\vec{r}_{1}) \varphi_{n\vec{k}'\sigma'}(\vec{r}_{2}) d\tau_{1} d\tau_{2} - \\ - \int \varphi_{n\vec{k}\sigma}^{*}(\vec{r}_{1}) \psi_{n\vec{k}'\sigma'}^{*}(\vec{r}_{2}) g_{12} \varphi_{n\vec{k}'\sigma'}(\vec{r}_{1}) \varphi_{n\vec{k}\sigma}(\vec{r}_{2}) d\tau_{1} d\tau_{2}) + \\ + 2\sum_{\vec{k}} [\varepsilon_{l} + \int \varphi_{l\vec{k}}(\vec{r}) (U_{+} - \sum_{\vec{k}'} U_{+}(\vec{r} - \vec{k}') \varphi_{l\vec{k}}(\vec{r}) d\vec{r}] - \\ - \sum_{\vec{k}} \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}'_{+}} \sum_{\sigma'} (\int \varphi_{l\vec{k}\sigma}^{*}(\vec{r}_{1}) \varphi_{l\vec{k}\sigma}(\vec{r}_{2}) g_{12} \varphi_{n\vec{k}'\sigma'}^{*}(\vec{r}_{1}) \varphi_{n\vec{k}'\sigma'}(\vec{r}_{2}) d\tau_{1} d\tau_{2}) - \\ - \sum_{\vec{k}} \sum_{\sigma} \sum_{\vec{k}'_{+}} \sum_{\sigma'} (\int \varphi_{l\vec{k}\sigma}^{*}(\vec{r}_{1}) \varphi_{l\vec{k}\sigma}(\vec{r}_{2}) g_{12} \varphi_{n\vec{k}'\sigma'}^{*}(\vec{r}_{1}) \varphi_{n\vec{k}'\sigma'}(\vec{r}_{2}) d\tau_{1} d\tau_{2}) - \\ (15)$$

Изложенные подходы (10) и (15) в описании одноэлектронных и однопозитронной волновых функций отличаются друг от друга. Функции  $\psi_{i\vec{k}} = e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{i\vec{k}}(\vec{r})$  есть бегущие волны и «размазаны» по кристаллу, в то время как функции  $\varphi_{i\vec{R}}$  являются однородно локализованными состояниями, Однако формально эти два подхода очень похожи. Действительно, с помощью системы локализованных функций можно построить и блоховские функции

$$\psi_{i\vec{k}} = N^{-1/2} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}} \varphi_{i\vec{R}}$$
(16)

Отсюда следует, что с помощью (16) можно построить тождественные антисимметризованные произведения

$$\chi_{l\vec{k}_{+}}(\vec{r}_{+})A\psi_{m\vec{k}_{l}\alpha}(\vec{r}_{1})\psi_{m\vec{k}_{l}\beta}(\vec{r}_{2})...\psi_{m\vec{k}_{l}\alpha}(\vec{r}_{2N})\psi_{n\vec{k}_{N}\alpha}(\vec{r}_{-})$$
(17)

$$\chi_{l\bar{R}\alpha}(\vec{r}_{+})A\varphi_{m\bar{R}_{1}\alpha}(\vec{r}_{1})\psi_{m\bar{R}_{1}\beta}(\vec{r}_{2})...\varphi_{m\bar{R}_{N}\beta}(\vec{r}_{2N})\varphi_{n\bar{R}\alpha}(\vec{r}_{-})$$
(18)

Функции (16) дают удовлетворительные результаты в случае слабого перекрытия. В нашем случае это не так. Лучше использовать приближение Ванье

$$a_{n\vec{R}} = N^{-1/2} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{R}} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r})$$
(19)

#### §2. Обоснование экситонной модели атома Ps

Выше рассмотрели вопрос как с помощью локализованных или блоховских функций могут быть найдены энергия и волновые функции системы *Ps* + кристалл. Однако, строго говоря, такого рода приближение не совсем оправдано, так как одноэлектронное приближение для *Ps* является грубой моделью. Можно формально использовать экситонную модель *Ps* для кристалла с заполненными оболочками [2-7]. Из принятой схемы следует, что позитронная зона и валентная электронная зона не обязательно совпадают. Они могут быть смещены друг относительно друга. Волновая функция системы *Ps* + кристалл может быть записана в виде

$$\Phi_{mnl}^{\sigma\sigma'}(\vec{k}_{-},\vec{k}_{+}) = \psi_{l\vec{k}_{+}\sigma'}A\psi_{m\vec{k}_{1}\alpha}\psi_{m\vec{k}_{1}\beta}...\psi_{m\vec{k}_{N}\beta}\psi_{n\vec{k}_{-}\sigma}$$
(20)

Волновая функция (20) описывает состояние, в котором электрон в зоне проводимости находится с волновым вектором  $\vec{k}_{-}$  и спином  $\sigma$ , а позитрон находится в позитронной зоне (проводимости) с волновым вектором  $\vec{k}_{+}$  и спином  $\sigma'$ , валентные же электроны кристалла последовательно занимают состояния с волновыми векторами  $\vec{k}_{i}$  и спинами  $\alpha, \beta$ . Полный квазиимпульс системы Ps + кристалл будет равен  $\vec{k}_{-} + \vec{k}_{+} = \vec{K}$ , а собственное значение проекции полного спина на ось квантования естественно равно  $(1/2)(\sigma + \sigma')\hbar$ . С помощью волновой функции (20) можем определить волновые функции Psопределенной мультиплетности. Заметим, что в простой модели Блоха энергия основного состояния системы Ps + кристалл есть просто  $\varepsilon_{n\vec{k}_{-}} - \varepsilon_{n\vec{k}_{+}}$ . Значение вектора  $\vec{K}$  заключается в том, что он определяет представление, по которому определяется волновая функция системы Ps + кристалл при операциях трансляционной симметрии кристалла. Вычислим матричные элементы на волновых функциях (20) с оператором  $H_0$ . Имеем

$$(mnl\vec{k}_{-}\vec{k}_{+} | H_{0} | mnl\vec{k}_{-}\vec{k}_{+}) = \delta_{\vec{k}_{-}\vec{k}_{+}'}\delta_{\vec{k}_{+}\vec{k}_{+}'}[E_{0}^{(1)} + W_{n}(\vec{k}_{-}) - W_{l}(\vec{k}_{+})] - \delta_{\vec{k}_{-}-\vec{k}_{+},\vec{k}'-\vec{k}_{+}'}[2(n\vec{k}_{-}l\vec{k}_{+}' | g | l\vec{k}_{+}n\vec{k}_{-}')]$$

$$(21)$$

где

$$W_{n}(\vec{k}_{-}) = \varepsilon_{n}(\vec{k}_{-}) + (n\vec{k}_{-} | U_{-} - V_{-} | n\vec{k}_{-}) +$$

$$+ \sum_{\vec{k}'} [2(n\vec{k}_{-}m\vec{k}' | g | n\vec{k}_{-}m\vec{k}') - (n\vec{k}_{-}m\vec{k}' | g | m\vec{k}'n\vec{k}_{-})]$$
(22)

$$W_{l}(\vec{k}_{+}) = \varepsilon_{l}(\vec{k}_{+}) + (l\vec{k}_{+} | U_{+} - V_{+} | l\vec{k}_{+}) - \sum_{\vec{k}'} (l\vec{k}_{+}m\vec{k}' | g | m\vec{k}'l\vec{k}_{-})]$$
(23)

Здесь

$$(n\vec{k}_{-}m\vec{k}' \mid g \mid m\vec{k}'n\vec{k}_{-}) = \iint \psi^*_{n\vec{k}_{-}}(\vec{r}_{1})\psi^*_{m\vec{k}'}(\vec{r}_{2})g_{12}\psi_{m\vec{k}'}(\vec{r}_{1})\psi_{n\vec{k}_{-}}(\vec{r}_{2})d\vec{r}_{1}d\vec{r}_{2}$$
(24)

Выражение (21) отличается от аналогичного выражения для истинного экситона отсутствием обменного взаимодействия меду позитроном и дыркой.

Как показано в [2-7], лучше рассматривать задачу (21) с точки зрения локализованных функций, а не блоховских функций. В этом случае волновая функция запишется в виде

$$\Phi_{mnl}^{\sigma\sigma'}(\vec{R}_i, \vec{R}_j) = a_{l\vec{k}_i\sigma'}Aa_{m\vec{R}_l\alpha}a_{m\vec{k}_l\beta}...a_{m\vec{R}_N\beta}a_{l\vec{k}_{-}\sigma}$$
(25)

Таким образом, состояния, описываемые волновыми функциями (20), (25) являются Фурье-компонентами друг друга

$$\Phi_{mnl}^{\sigma\sigma'}(\vec{k}_{-},\vec{k}_{+}) = N^{-1} \sum_{i} \sum_{j} \exp[i(\vec{k}_{-}\vec{R}_{j} - \vec{k}_{+}'\vec{R}_{i})]\phi_{mnl}(\vec{R}_{j},\vec{R}_{i})$$
(26)

Том случае необходимо диаганолизировать матрицу

$$(mnl\vec{R}_{i}\vec{R}_{j} \mid H_{0} \mid mnl\vec{R}_{i}'\vec{R}_{j}'), \qquad (27)$$

Матричные элементы которой имеют вид

$$(m\vec{R}n\vec{R}' \mid g \mid m\vec{R}''n\vec{R}''') = \iint a_{m\vec{R}}^*(\vec{r}_1)a_{n\vec{R}'}(\vec{r}_2)g_{12}a_{m\vec{R}''}(\vec{r}_2)a_{n\vec{R}'''}(\vec{r}_2)d\vec{r}_1d\vec{r}_2, \qquad (28)$$

$$(m\vec{R}l\vec{R}' \mid g \mid m\vec{R}''l\vec{R}''') = \iint a_{m\vec{R}}^{*}(\vec{r_{1}})a_{l\vec{R}'}(\vec{r_{2}})g_{12}a_{m\vec{R}''}(\vec{r_{2}})a_{l\vec{R}'''}(\vec{r_{2}})d\vec{r_{1}}d\vec{r_{2}}, \qquad (29)$$

$$(n\vec{R}l\vec{R}' \mid g \mid n\vec{R}''l\vec{R}''') = \iint a_{n\vec{R}}^*(\vec{r}_1)a_{l\vec{R}'}(\vec{r}_2)g_{12}a_{n\vec{R}''}(\vec{r}_2)a_{l\vec{R}'''}(\vec{r}_2)d\vec{r}_1d\vec{r}_2, \qquad (30)$$

В свою очередь

$$W(n\vec{R}, n\vec{R}') = \left( n\vec{R} \middle| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_{-} \middle| n\vec{R}' \right) + \sum_{\vec{R}''} 2(n\vec{R}m\vec{R}'' \mid g \mid n\vec{R}'m\vec{R}'') - (n\vec{R}m\vec{R}'' \mid g \mid m\vec{R}''n\vec{R}') - \sum_{\vec{R}''} 2(n\vec{R}l\vec{R}'' \mid g \mid n\vec{R}'l\vec{R}'') \right)$$
(31)

$$W(l\vec{R}, l\vec{R}') = \left( l\vec{R} \middle| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_+ \middle| l\vec{R}' \right) + \sum_{\vec{R}''} 2(l\vec{R}n\vec{R}'' \mid g \mid l\vec{R}'n\vec{R}) - \sum_{\vec{R}''} 2(l\vec{R}m\vec{R}'' \mid g \mid l\vec{R}'m\vec{R})$$
(32)

Таким образом

$$W(n\vec{R}, n\vec{R}', l\vec{R}, l\vec{R}') = \left( n\vec{R} \middle| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_- \middle| n\vec{R}' \right) + \left( l\vec{R} \middle| -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_+ \middle| l\vec{R}' \right) + \sum_{\vec{R}''} 2(n\vec{R}m\vec{R}'' \mid g \mid n\vec{R}'m\vec{R}'') - (n\vec{R}m\vec{R}'' \mid g \mid m\vec{R}''n\vec{R}') - \sum_{\vec{R}''} (l\vec{R}m\vec{R}'' \mid g \mid l\vec{R}'m\vec{R}) - \sum_{\vec{R}''} (l\vec{R}n\vec{R}'' \mid g \mid l\vec{R}'n\vec{R}'') \right)$$
(33)

Матричные элементы  $(mnl\vec{R}_i\vec{R}_j | H_0 | mnl\vec{R}'_i\vec{R}'_j)$  можно упростить при  $\vec{R}_j = \vec{R}_i + \vec{\beta}$  и  $\vec{R}'_j = \vec{R}_i + \vec{\beta}'$ , где  $\vec{\beta} = \vec{r}_- - \vec{r}_+$ . Тогда этот матричный элемент будет зависеть лишь от  $\vec{R}' - \vec{R}, \vec{\beta}, \vec{\beta}'$ .

# §3. Экситонная модель атома Ps

Для того, чтобы волновая функция  $P_s$  зависела от волнового вектора  $\vec{K}$  и одновременно от  $\vec{\beta}$  - расстояния между электроном и позитроном, воспользуемся экситонным представлением Ванье [5,6]

$$\Phi_{mnl}(\vec{K},\vec{\beta}) = N^{-1/2} \sum_{\vec{k}} \exp(-i\vec{\beta}\vec{K})\phi_{mnl}(\vec{k}-\vec{K},\vec{k}_i), \qquad (34)$$

$$\Phi_{mnl}(\vec{K},\vec{\beta}) = N^{-1/2} \sum_{\vec{R}} \exp(-i\vec{K}\vec{R})\phi_{mnl}(\vec{R},\vec{R}+\vec{\beta}_i), \qquad (35)$$

Теперь нетрудно выписать матричные элементы *Ps* в экситоном представлении

$$(mnl\vec{K}\vec{\beta} \mid H_{0} \mid mnl\vec{K}\vec{\beta}') = \delta_{\beta\beta'}E_{0}^{(1)} + W(nl\vec{\beta}, nl\vec{\beta}') - \exp[i\vec{K}(\vec{\beta} - \vec{\beta}')]W(mnl\vec{0}, mnl\vec{\beta} - \vec{\beta}') - (n\vec{\beta}m\vec{0} \mid g \mid n\vec{\beta}'m\vec{0}) - (l\vec{\beta}m\vec{0} \mid g \mid l\vec{0}m\vec{\beta}') + \sum_{\vec{R}\neq0} (n\vec{\beta}m\vec{R}' \mid g \mid n\vec{R} + \vec{\beta}'m\vec{0}) - \sum_{\vec{R}\neq0} (l\vec{\beta}m\vec{R} \mid g \mid m\vec{0}l\vec{R} + \vec{\beta}')$$

$$(36)$$

Вторые два члена выражения (36) можно записать в виде [5]

$$W(nl\vec{\beta}, nl\vec{\beta}') - \exp[i\vec{K}(\vec{\beta} - \vec{\beta}')]W(mnl\vec{0}, nl\vec{\beta} - \vec{\beta}') =$$

$$= N^{-1} \sum_{\vec{k}} \exp[i\vec{K}(\vec{\beta} - \vec{\beta}')][W_n(\vec{k}) - W_l(\vec{k} - \vec{K})] =$$

$$= N^{-1} \exp[i\vec{K}(\vec{\beta} - \vec{\beta}')/2] \sum_{\vec{k}} \exp[i\vec{K}(\vec{\beta} - \vec{\beta}')][W_n(\vec{k} + \vec{K}/2) - W_l(\vec{k} - \vec{K}/2)]$$
(37)

Вторая форма эквивалентная экситонного представления (35)соответствует связанным вместе, но разделенным расстоянием  $\vec{\beta}$  электрона и позитрона с полным импульсом  $\vec{K}$ . Случай  $\vec{\beta} = 0$  формально, как раз соответствует позитронию Френкеля, так как  $\phi_{mnl}(\vec{R},\vec{R})$  есть волновая функция состояния, в котором позитрон и электрон находятся на одном узле решетки. По аналогии с экситоном Френкеля такого рода состояние N кратно вырождено. Конечно, образование линейной комбинации типа (35) снимает это вырождение, так что среднее значение  $H_0$  в состоянии с волновой фукцией  $\phi_{mnl}(\vec{R},\vec{R}+\vec{\beta})$  не зависит от  $\vec{R}$  и волновые функции (35) представляют собой невырожденные состояния. Для диагонализации оператора  $H_0$  необходимо определить линейные комбинации волновых функций (35) с разными  $\vec{\beta}$ . Эти линейные комбинации в случае *Ps* в кристалле имеют вид

$$\Psi_{mnlv\vec{K}} = \sum_{\vec{\beta}} u_{mnlv\vec{K}}(\vec{\beta})\phi_{mnl}(\vec{K},\vec{\beta})$$
(38)

Здесь коэффициенты  $u_{mnlv\bar{k}}$  удовлетворяют системе линейных уравнений

$$\sum_{\vec{\beta}'} (mnl\vec{K}\vec{\beta} \mid H_0 \mid mnl\vec{K}\vec{\beta}') u_{mnlv\vec{K}}(\vec{\beta}') = E u_{mnlv\vec{K}}(\vec{\beta}), \qquad (39)$$

А собственные значения находятся из обычного секулярного уравнения

$$\det\left|(mnl\vec{K}\vec{\beta} \mid H_0 \mid mnl\vec{K}\vec{\beta}') - E_{\vec{\beta}\vec{\beta}'}\right| = 0$$
(40)

# §4. Исследование энергетического спектра атома *Ps*

Чтобы исследовать энергетический спектр атома *Ps*, необходимо матрицу полного гамильтониана привести к диагональному виду по отношению к вектору  $\vec{\beta}$ . Как и в [5], разделим матричный элемент ( $mnl\vec{K}\vec{\beta} \mid H_0 \mid mnl\vec{K}\vec{\beta}'$ ) по схеме

$$(mnl\vec{K}\vec{\beta} \mid H_0 \mid mnl\vec{K}\vec{\beta}') = H_{\vec{\beta}\vec{\beta}'}(\vec{K}) + F_{\vec{\beta}\vec{\beta}'}(\vec{K}), \qquad (41)$$

где для случая *Ps* 

$$H_{\vec{\beta}\vec{\beta}'}(\vec{K}) = \delta_{\beta\beta'}E_{0}^{(1)} + \exp[i\vec{K}(\vec{\beta} - \vec{\beta}')/2]N^{-1}\sum_{\vec{k}}\exp[i\vec{K}(\vec{\beta} - \vec{\beta}')[W_{-}(\vec{k} + \vec{K}/2) - W_{+}(\vec{k} - \vec{K}/2)] - \delta_{\vec{\beta}\vec{\beta}'}e^{2}/\beta$$
(42)

$$F_{\vec{\beta}\vec{\beta}'}(\vec{K}) = -[(n\vec{\beta}m\vec{0} \mid g \mid n\vec{\beta}'m\vec{0}) - \delta_{\vec{\beta}\vec{\beta}'}e^2 / \beta - (l\vec{\beta}m\vec{0} \mid g \mid l\vec{\beta}'m\vec{0})] + \sum_{\vec{R}\neq 0} \exp(i\vec{K}\vec{R})(l\vec{\beta}m\vec{R}' \mid g \mid l\vec{R} + \vec{\beta}'m\vec{0}) - (n\vec{\beta}m\vec{R} \mid g \mid n\vec{R} + \vec{\beta}'m\vec{0})]$$
(43)

Теперь следует подставить выражение для  $H_{\vec{\beta}\vec{\beta}'}(\vec{K})$  в секулярное уравнение (40). При этом в первом приближении получим *Ps* Ванье – его волновые функции и водородоподобный спектр, то есть

$$E_{0}^{(1)}U'_{\nu\bar{K}}(\vec{\beta}) + \sum_{\vec{\beta}'} N^{-1} = \delta_{\beta\beta'}E_{0}^{(1)} + \sum_{\vec{k}} \exp[i\vec{K}(\vec{\beta} - \vec{\beta}')[W_{-}(\vec{k} + \vec{K}/2) - W_{+}(\vec{k} - \vec{K}/2)]U'_{\nu\bar{K}}(\vec{\beta}') - (e^{2}/\beta)U'_{\nu\bar{K}}(\vec{\beta}) = EU'_{\nu\bar{K}}(\vec{\beta})$$

$$(44)$$

где

$$U'_{\nu\vec{k}}(\vec{\beta}) = \exp[-i\vec{K}\vec{\beta}/2)U_{\nu\vec{k}}(\vec{\beta})$$
(45)

Используя процедуру Ванье типа

$$N^{-1}\sum\sum \exp[i\vec{K}(\vec{\beta}-\vec{\beta}')f(\vec{k})g(\vec{\beta}')$$
(46)

И представляя (46) в виде [5]

$$N^{-1/2} \sum_{\vec{\chi}} \exp(-i\vec{\chi}\vec{\beta}) f(\vec{\chi}) G(\vec{\chi}), \qquad (47)$$

что эквивалентно

$$f(-i\nabla)g(\vec{\beta}) \tag{48}$$

Таким образом, уравнение (44) запишется в виде

$$\left[W_{-}(i\nabla + \vec{K}/2) + W_{+}(-i\nabla + \vec{K}/2)\right] - \frac{e^{2}}{\beta} \right]U' = (E - E_{0}^{(1)})U'$$
(49)

Как обычно полагаем, что электронная зона проводимости и позитронная зона имеют при  $\vec{K} = 0$  экстремумы. Поэтому

$$W_{-} = E_{-} - \frac{\hbar^{2} k_{-}^{2}}{2m_{-}^{*}}; W_{+} = E_{+} - \frac{\hbar^{2} k_{+}^{2}}{2m_{+}^{*}}$$
(50)

И уравнение (49) приводится к стандартному виду

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{e^2}{\beta} - \frac{\hbar^2}{2i}\left(\frac{1}{m_+^*} - \frac{1}{m_-^*}\right)\vec{K}\vec{\nabla}\right] = \left[E - E_0^{(1)} - E_g^+ - \frac{1}{8\mu}\hbar^2K^2\right]U'$$
(51)

Здесь  $E_g^+ = E_- - E_+ -$  энергетическая щель между электронной и позитронной зонами,  $\mu = m_+^* m_-^* / (m_+^* + m_-^*)$  - эффективная приведенная масса атома *Ps*.

Далее, полагая

$$U' = \exp(i\alpha \vec{K}\vec{\beta})F(\vec{\beta}) \tag{52}$$

И подставляя (52) в (51), получаем

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{e^2}{\beta}\right)F = \left[E - E_0^{(1)} - E_g^+ - \frac{\hbar^2 K^2}{2(m_+^* + m_-^*)}\right]F$$
(53)

Таким образом, для  $P_S$  Ванье-Френкеля собственное значение матрицы  $H_{\vec{BB'}}(\vec{K})$  имеют вид

$$E_{v\bar{K}}^{(0)} = E_0^{(1)} + E_g^+ + \frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} + \frac{\hbar^2 K^2}{2(m_+^* + m_-^*)},$$
(54)

а функции

$$F_{v} \equiv F_{nlm}(\vec{\beta}) \tag{55}$$

Волновая функция Ps Ванье-Френкеля в кристалле следовательно имеет вид

$$\psi_{\nu\vec{K}} = \sum_{\vec{\beta}} U_{\nu\vec{K}}(\vec{\beta})\phi(\vec{K},\vec{\beta}) = \sum_{\vec{\beta}} \exp(i\alpha'\vec{K}\vec{\beta})F_{\nu}(\vec{\beta})\phi(\vec{K},\vec{\beta}),$$
(56)

где

$$\alpha' = \frac{1}{2} + \alpha = m_{-}^{*} / (m_{+}^{*} + m_{-}^{*})$$
(57)

Выше нашли выражение для энергии и волновые функции *Ps* малого радиуса в первом приближении (см. (54)-(56)). Видим, что диэлектрическая проницаемость не входит в эти выражения. В отличие от экситона такого рода приближение хорошо соответствует экспериментальным данным для *Ps*. Действительно, потенциальная энергия электрона в поле позитрона (как и в случае электронной дырки) зависит от поляризации им решетки кристалла. В

случае *Ps* малого радиуса электрон находится на малом расстоянии от позитрона. Поэтому его кинетическая энергия велика, вследствие чего валентные электроны не успевают реагировать на движение электрона, так как частота движения электрона вокруг позитрона значительно превосходит эффективную резонансную частоту валентных электронов, равную  $E_g^+/\hbar \approx (E_- - E_+)/\hbar$ . Отсюда следует, что для *Ps* радиуса  $\beta$  угловая частота вращения электрона  $\omega = J\mu\beta^2 \approx \hbar/\mu\beta^2 >> E_g^+$ , где *J* - угловой момент. Это соответствует случаю  $\beta < (\hbar^2/\mu E_g^+) \equiv \beta$ . Например, для *Ps* с эффективной массой  $\mu = m/2$  в кристалле с  $E_g^+ \approx 2$  эВ радиус  $\beta_E \approx 5a_0$ , где  $m_+^* = m_-^* = m$  и  $a_0$  - Боровский радиус.

Отметим еще одно важное отличие *Ps* малого радиуса от экситона Ванье. В экситоне при малых расстояниях важную роль играют процессы обмена между электронной дыркой и электроном. В *Ps* малого радиуса такого рода эффект отсутствует, так как электрон и позитрон в нерелятивистском приближении частицы не тождественные, а следовательно, обычное кулоновское обменное взаимодействие можем не учитывать. Далее, как мы Ps радиуса Френкеля-Ванье предполагает видели, модель малого использование метода эффективной массы, основанное на одноэлектронном приближении. Для позитрона эта модель является более точной, нежели для электрона, в силу отсутствия обменных эффектов. Электрон и позитрон с эффективными массами  $m_{+}^{*}, m_{-}^{*}$  могут находиться на сколь угодно близких расстояниях. Конечно, следовало бы вычислить при этом зависимость  $m_{\pm}^* = m_{\pm}^*(\beta)$ . Но обычно ограничиваются именно случаем  $m_{\pm}^* = const$ . Сами же эффективные массы электрона и позитрона могут быть сколь угодно большими, несмотря на локализацию этих частиц в области атомных размеров [5].

Покажем, что это обстоятельство может иметь решающее значение для обоснования концепции «тяжелого» Ps малого радиуса. В виду малых размеров тяжелого  $(Ps)^*$  малого радиуса диэлектрическое экранирование не играет существенной роли [5-7]. Кроме того, можно предположить, что эффективная масса позитрона  $m_{+}^*$  значительно больше эффективной массы

16

электрона  $m_{+}^{*}: m_{+}^{*} >> m_{-}^{*}$ . Для простоты расчетов принимаем  $m_{-}^{*} \sim m$ . В этом случае тяжелый  $(Ps)^{*}$  ближе по своим свойства к атому водорода нежели к свободному атому *Ps*. Таким образом роль «ядра» в тяжелом френкелевском  $(Ps)^{*}$  играет позитрон.

С учетом сдвига по энергии выражение (54) для  $(Ps)^*$  имеет вид

$$E_{\nu\bar{K}} = -\frac{13.56}{2n^2} \frac{2\mu}{m} + \frac{\hbar^2 K^2}{2(m_+^* + m_-^*)}$$
(58)

Свойства тяжелого (*Ps*)<sup>\*</sup> определяются плотностью волновых функций электрона и позитрона в области их перекрытия в нуле. Вычислим, исходя из выражения (56), это значение. Так как

$$\psi_{v\vec{k}} = \sum_{\vec{\beta}} \exp(i\alpha'\vec{K}\vec{\beta})F_{v}(\vec{\beta})\phi(\vec{K},\vec{\beta})N^{-1/2}\sum_{\vec{R}} \exp(i\vec{K}\vec{R})\phi_{mnl}(\vec{R},\vec{R}+\vec{\beta}) =$$

$$= \sum_{\vec{\beta}} \exp(i\alpha'\vec{K}\vec{\beta})F_{v}(\vec{\beta})N^{-1/2}\sum_{\vec{K}} \exp\{-i\vec{\beta}\vec{K})\phi_{nlm}(\vec{k}-\vec{K},\vec{k})$$
(59)

Откуда

$$\psi_{\nu\vec{K}}(\vec{K},\vec{\beta}\to 0) = F_{\nu}(0)N^{-1/2}\sum_{\vec{k}}\phi_{nlm}(\vec{k}-\vec{K},\vec{k})$$
(60)

Следовательно

$$\psi^{2}_{\nu \vec{K}}(\vec{K},\vec{\beta}\to 0) = \left|F_{\nu}(0)\right|^{2} \left|N^{-1/2}\sum_{\vec{K}}\phi_{nlm}(\vec{k}-\vec{K},\vec{k})\right|^{2}$$
(61)

Вычислим выражение  $\left|N^{-1/2}\sum_{\vec{k}}\phi_{nlm}(\vec{k}-\vec{K},\vec{k})\right|^2$ 

$$\left| N^{-1/2} \sum_{\vec{k}} \phi_{nlm}(\vec{k} - \vec{K}, \vec{k}) \right|^2 = N^{-1} \sum_{\vec{k}} \phi_{nlm}(\vec{k} - \vec{K}, \vec{k}) \sum_{\vec{k}'} \phi_{nlm}(\vec{k}' - \vec{K}, \vec{k}')$$
(62)

Заменим в (62) суммирование интегрированием

$$N^{-1} \int N\phi_{nlm}(\vec{k} - \vec{K}, \vec{k}) \sum_{\vec{k}} \phi_{nlm}(\vec{k} - \vec{K}, \vec{k}) \delta(\vec{k} - \vec{k}' - \vec{K}, \vec{k}' - \vec{k}) = 1$$
(63)

Таким образом

$$\psi_{\nu\bar{K}}^{2} \equiv |F_{\nu}(0)|^{2} = |\psi(0)|_{n}^{2}$$
(64)

Нетрудно убедиться, что

$$|\psi(0)|_{n}^{2} = \frac{(2\mu/m)^{3}}{8\pi a_{0}n^{3}} = |\psi_{0}(0)|_{n}^{2} (2\mu/m)^{3}$$
(65)

Здесь  $|\psi_0(0)|_n^2$  - электронная плотность в нуле тяжелого  $(Ps)^*$ ,  $a_0$  - Боровский радиус основного состояния, n - главное квантовое число.

Рассмотрим, следуя [9-13], свойства тяжелого  $(Ps)^*$  для основного состояния (n = 1). Простые вычисления дают следующее выражение для параметра магнитного тушения Q тяжелого  $(Ps)^*$ 

$$Q = Q_0 \frac{m(m_+^* + m_-^*)^3}{8m_+^{*2}m_-^{*2}},$$
(66)

где  $Q_0$  - параметр магнитного тушения свободного атома Ps.

Исследования показали [9-13], что в щелочно-галоидных кристаллах (например, LiF) эффективная масса позитрона  $m_+^* \approx 20m$ , то есть можем принять приблизительно  $m_+^* >> m_-^*, m_-^* \approx m$ . В этом случае

$$Q = Q_0 \frac{m_+^*}{8m},$$
 (67)

То есть эффективное магнитное поле, действующее на  $(Ps)^*$  в LiF, равно

$$H_{eff} = H_{\sqrt{\frac{m_{+}^{*}}{8m}}}$$
(68)

Для вероятности  $3\gamma$  – аннигиляции  $P_{3\gamma}$  триплетного  $(Ps)^*$  получаем выражение

$$P_{3\gamma} = I_2 \frac{\tau_2}{\tau_t^0} \left(\frac{2\mu}{m}\right)^3 + (1 - \frac{4}{3}I_2)\frac{1}{372}$$
(69)

Здесь  $I_2$  - интенсивность долгоживущей компоненты,  $\tau_2$  - долгое время жизни позитронов в кристалле,  $\tau_t^0 = 1, 4 \cdot 10^{-7}$  с – время жизни свободного триплетного *Ps*.

Время жизни сингленого  $(Ps)^*$  составляет величину

$$\tau_{s} = 1,25 \cdot 10^{-10} \, (m/2\mu)^{3}, c \tag{70}$$

$$\tau_t = 1, 4 \cdot 10^{-7} (m/2\mu)^3, c \tag{71}$$

Если принять для *LiF*  $\mu \approx m$ , то времена жизни оказываются равными  $\tau_s \approx 1,57 \cdot 10^{-11}, c$ , а  $\tau_t \approx 1,75 \cdot 10^{-8}, c$ . Расчетная же величина  $P_{3\gamma}$ , согласно [1], оказывается равной  $P_{3\gamma} / P_{3\gamma}^0 \approx 4$ .

Таким образом, для тяжелого  $(Ps)^*$ , и впрочем и для любого Ps малого радиуса в кристалле должны наблюдаться: а) аномально сильное магнитное тушение; б) повышенная вероятность  $3\gamma$  – аннигиляции  $P_{3\gamma}$ , в) времена жизни в синглетном состоянии  $\tau_s \equiv \tau_0 \approx 10^{-11}$ , *c*. Экспериментальные данные [1] подтверждают эти первые два вывода. Поиск же короткоживущих

позитронных состояний с  $\tau_0 \approx 10^{-11}, c$  несомненно представляет интерес для позитроники ионных кристаллов

### §5. Механизмы переноса свободного Ps

Механизмы переноса Ps в кристалле существенным образом зависят от природы Ps - фононного взаимодействия [6,7]. В случае сильной Ps фононной связи вероятность перехода Ps из узла n в узел n' в единицу времени определяется выражением [6]

$$W(n,n') = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\dots N_{\chi} \dots} \left| H_{\bar{n}'N',\bar{n}N} \right|^2 \delta(E_{\bar{n}N} - E_{\bar{n}'N'})$$
(72)

Здесь  $|H_{\vec{n}'N',\vec{n}N}|^2$  - матричный элемент полного оператора энергии кристалла, построенный на функциях  $\psi_{\vec{n}N} = \psi_{mnl}(\vec{k},\vec{\beta}), \psi_{\vec{n}'N'} = \psi_{mnl}(\vec{k}',\vec{\beta}')$ . Вычисления дают

$$W(n,n') = \frac{1}{\hbar} \sum_{\dots N_{\chi}\dots} |V_{\overline{n}\overline{n'}}|^2 \delta(E_{\overline{n}N} - E_{\overline{n'}N})$$
(73)

Из этого выражения следует, что длина свободного пробега *Ps* малого радиуса в точности равна величине постоянной решетки.

Так как концентрация атомов *Ps* ничтожно мала, то кинетическое уравнение для него сводится к уравнению диффузии. Выражение для коэффициента диффузии имеет вид

$$D = \frac{1}{3} \frac{l^2}{\tau} , \qquad (74)$$

где  $\tau = 1/W, l = a$ . Отсюда для *Ps*, испытывающего сильное *Ps* - фононное взаимодействие [6]

$$D = \frac{a^2}{3\hbar} |V_n|^2 \left| \frac{\pi}{B} \right|^{1/2} \exp\left( -\frac{A_1^2}{4B} \right) ,$$
 (75)

Здесь параметры  $A_1, B$  являются функциями координат нормальных колебаний,  $|V_n|^2$  - матричный элемент.

Из выражения (75) следует, что коэффициент диффузии локализованного *Ps* посредством сильного взаимодействия с фононами с ростом температуры растет от некоторого значения при T = 0 до величины, которая при температурах, больших дебаевской температуры, представляет собой экспоненциальную зависимость от T

$$D \sim \exp(-Q/kT), Q > 0 \tag{76}$$

Рассмотрим более подробно практически важный случай *Ps* - фононной связи, когда *Ps* можно рассматривать как свободный атом. В этом случае для определения коэффициента диффузии необходимо знать время релаксации, определяемое выражением [6]

$$\frac{1}{\tau} = -\sum_{\vec{q}_{S}} \frac{\Delta k_{z}(\vec{q})}{k_{z}} \left[ W_{n}^{\vec{k}}(\vec{q}_{S}) + W_{u}^{\vec{k}}(\vec{q}_{S}) \right]$$
(77)

где  $\vec{k}$  - волновой вектор *Ps* до столкновения,  $\Delta k_z(\vec{q})$  - изменение волнового вектора *Ps* при столкновении с фононами  $\vec{q}_s$ ,  $W_u^{\vec{k}}(\vec{q}_s)$  - вероятность поглощения фонона  $\vec{q}_s$ , а  $W_u^{\vec{k}}(\vec{q}_s)$  - вероятность испускания фонона  $\vec{q}_s$  (в единицу времени), Естественно, что  $\vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q}$ , а индекс *s* определяет номер ветви фонона.

В общем случае

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{ak}} + \frac{1}{\tau_{op}}$$
(78)

Здесь  $\tau_{ak}$  и  $\tau_{ap}$  - число столкновений *Ps* с акустическими и оптическими фононами в 1 с,  $\tau$  - время, равное времени свободного пробега *Ps* 

относительно столкновений с фононами, причем достаточно нескольких столкновений, чтобы *Ps* пришел в термодинамическое равновесие с фононами.

Коэффициент диффузии *Ps* определяется через время релаксации по формуле

$$D = \frac{1}{3} \tau \overline{v}^2, \tag{79}$$

где  $\overline{v}^2$  - средний квадрат групповой скорости Ps.

Для вычисления *W* в качестве волновых функций в операторе *Ps* - фононного взаимодействия используем приближение плоских волн. Согласно [6]

$$W_{n}^{\vec{k}}(\vec{q}_{S}) = \frac{2\pi}{N\hbar} \left| F(\vec{k} + \vec{q}, \vec{k}, \vec{q}_{S}) \right|^{2} \delta[E(\vec{k}) - E(\vec{k} + \vec{q}) + \hbar\omega_{S}(\vec{q})] \overline{N}_{\vec{q}_{S}},$$
(80a)

$$W_{u}^{\vec{k}}(\vec{q}_{S}) = \frac{2\pi}{N\hbar} \left| F(\vec{k} + \vec{q}, \vec{k}, \vec{q}_{S}) \right|^{2} \delta[E(\vec{k}) - E(\vec{k} + \vec{q}) + \hbar\omega_{S}(\vec{q})](\overline{N}_{\vec{q}_{S}} + 1),$$
(806)

Принимаем

$$\vec{k} = \vec{k}_0 + \vec{\chi} \tag{81}$$

Тогда в приближении изотропной эффективной массы закон сохранения энергии при поглощении и испускания фонона атомом *Ps* имеет вид

$$\frac{\hbar^2 \chi^2}{2m^*} \pm \hbar \omega_s(\vec{q}) = \frac{\hbar^2 (\vec{\chi}^2 \pm \vec{q})^2}{2m^*}$$
(82)

Как обычно, для акустических фононов  $\omega_{\scriptscriptstyle S}(\vec{q}) = v_{\scriptscriptstyle 0} q$ , где  $v_{\scriptscriptstyle 0}$  - скорость звука.

В таком случае из (82) получаем

$$q = \mp 2\chi \cos\theta \pm \frac{2m^* v_0}{\hbar}, \frac{m^* v_0}{\hbar} \sim 10^5 \left(\frac{m^*}{m}\right), \,\mathrm{cm}^{-1}$$
(83)

Среднее значение при температуре T определяется соотношением

$$\frac{\hbar^2 \chi^2}{2m^*} = \frac{3}{2} k_B T \tag{84}$$

Откуда

$$(\bar{\chi}^2)^{1/2} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{3m^* k_B T}$$
(85)

Используя ряд упрощающих представлений [6], можем записать

$$|F_{ak}(\vec{k} + \vec{q}; \vec{k}; \vec{q}_S)|^2 = |F_0^{ak}|^2 aq$$
(86)

$$F_{op}(\vec{k} + \vec{q}; \vec{k}; \vec{q}_{S})|^{2} = |F_{0}^{op}|^{2}$$
(87)

Здесь  $|F_0^{ak}|^2 u |F_0^{op}|^2$  - постоянные величины. Окончательные вычисления дают (при  $\zeta = 2 \chi \hbar v_0 / k_B T < 1$ )

$$\frac{1}{\tau_{ak}(\vec{\chi})} = \frac{a^4 m^* |F_0^{ak}|^2}{\pi \hbar^3 (\vec{k}\vec{\chi})} \vec{\chi} \left(\frac{k_B T}{\hbar v_0}\right) \vec{\chi}^4$$
(88)

В том случае, если минимум позитрониевой зоны расположен в центре зоны Бриллюэна, то есть при  $\vec{k} = \vec{\chi}$ , то для коэффициента диффузии имеем температурную зависимость

$$D \sim T^{-1/2} \tag{89}$$

В области очень низких температур (  $\varsigma = 2 \chi \hbar v_0 / k_B T >> 1$ ) формула (88) имеет вид

$$\frac{1}{\tau_{ak}(\vec{\chi})} = \frac{24a^4m^* |F_0^{ak}|^2}{5\pi\hbar^3 \,(\vec{k}\vec{\chi})}$$
(90)

В случае, если  $\vec{k} = 0$ , то коэффициент диффузии *Ps* при низких температурах уже не зависит от температуры, то есть

$$D = \frac{1}{3}\tau_{ak}(\vec{\chi})\vec{v}^2 \sim const$$
<sup>(91)</sup>

Рассмотрим далее рассеяние *Ps* на оптических фононах, отвечающих ветви оптических колебаний кристалла. Согласно [6], имеем

$$\frac{1}{\tau_{op}(\vec{\chi})} = \frac{2a^3 m^* |F_0^{op}|^2}{(\vec{k}\vec{\chi})\vec{\chi}} \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega_s(0)}\right)\vec{\chi}^4$$
(91a)

Сравнение выражения (91а) с (88) позволяет заключить, что время релаксации, относящееся к рассеянию *Ps* на оптических фононах, имеет при  $k_B T > \hbar \omega_s(0)$  такую же температурную зависимость, как и в случае рассеяния *Ps* на акустических фононах ( $\varsigma < 1$ ). В области низких температур,  $k_B T < \hbar \omega_s(0)$ , большинство *Ps* лишь поглощают оптические фононы. Так как их число при низких температурах экспоненциально мало,  $\overline{N}_{\bar{q}_s} \sim \exp[-\hbar \omega_s(0)/k_B T]$ , то  $\tau_{op} >> \tau_{ak}$  и таким образом  $\tau = \tau_{ak}$ .

Приведем оценки  $\tau_{ak}$  для Ps на основе данных для экситонов [6]. Так как

$$\left|F_0^{ak}\right|^2 \approx \frac{\hbar U_0^2}{Mav_0},\tag{92}$$

где  $M\,$  - масса молекулы,  $U_{_0}\approx M_{_{01}}$  - константа связи.

Для сферически симметричной Ps зоны имеем

$$\tau_{ak} \approx \left(\frac{m^*}{\hbar \bar{\chi}}\right) \left|\frac{M_{01}}{U_0}\right|^2 \frac{M v_0^2}{k_B T} a$$
(93)

$$l = \left(\frac{\hbar \vec{\chi}}{m^*}\right) \tau_{ak} \approx \left|\frac{M_{01}}{U_0}\right|^2 \frac{M v_0^2}{k_B T} a$$
(94)

Как и в случае экситонов принимаем:  $|U_0| \sim |M_{01}|$ ,  $M \approx 3 \cdot 10^5 m$ ,  $v_0 \approx 2 \cdot 10^5$  см/с, T = 100K. В этом случае  $l \approx 10^3 a$ . При  $m^* \approx m$  (случай легкого Ps) средняя скорость  $Ps \ v \approx 5 \cdot 10^6$  см/с, так что  $\tau_{ak} \approx 10^{-11} c$ .

Далее оценим времена термализации свободного Ps на примесях  $\tau_i$  и дефектах кристаллической решетки  $\tau_d$ . В этом случае полное время релаксации равно

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{ak}} + \frac{1}{\tau_{op}} + \frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_d}$$
(95)

Пусть С – концентрация примеси. Тогда

$$\tau_i = 1/C\sigma_i \vec{v} , \qquad (96)$$

где  $\vec{v}$  – средняя скорость  $P_s$ , а  $\sigma_i$  - сечение рассеяния  $P_s$  на примеси, определяемое выражением [6]

$$\sigma_{i} = 4\pi |A|^{2} = \pi a^{2} \frac{\varsigma^{2}}{(1 - \varsigma + \varsigma x^{2})^{2} + \pi^{2} x^{2} \varsigma^{2} / 4} , \qquad (97)$$

где  $\zeta = \pi \Delta / 2M; x = k / k_m.$ 

В случае  $\zeta \ll 1$ , сечение рассеяния

$$\sigma_i = \pi a^2 \varsigma^2 \,, \tag{98}$$

При *с* >> 1 имеем наоборот

$$\sigma_i \approx \pi a^2 \tag{99}$$

Введем отношение  $\rho = -\varepsilon_l / M$ , где  $\varepsilon_l$  – энергия локального состояния, отсчитываемая от дна *Ps* зоны. Тогда радиус такого состояния равен

$$r_l = \frac{a}{\pi \sqrt{\rho}} \,, \tag{100}$$

а сечение рассеяния Ps с предельно малыми волновыми векторами равно

$$\sigma_i(0) = 4\pi r_l^2, \tag{101}$$

Длину свободного пробега *Ps*, отвечающую рассеянию на примесях, как и в случае экситона, можно оценить по формуле

$$l_i = a / \pi v; v = N_i / N \tag{102}$$

Здесь  $v = N_i / N$  - отношение числа примесей к общему числу атомов (молекул) в единице объема. Так, что при концентрации  $N_i \sim 0.01$  % величина свободного пробега  $l_i$  равна десяткам тысяч постоянной решетки и  $l_i >> l_{ak}$ .

Оценим далее процесс рассеяния свободного *Ps* на дефектах кристаллической решетки (вакансии, дислокации и т.д.). Для сечения рассеяния *Ps* на вакансиях можно использовать формулу (99). Концентрация

переориентированных дефектов (например, молекул в молекулярных кристаллах) определяется выражением

$$C = N \exp(-Q/k_B T), \tag{103}$$

Так что коэффициент диффузии зависит от температуры экспоненциальным образом

$$D = D_0 \exp(Q/k_B T), \tag{104}$$

где

$$D_0 = \overline{v} / \sigma N \tag{105}$$

Для расчета коэффициента диффузии на зернах применимо соотношение [6]

$$D = \frac{1}{3} l \overline{v} \approx K L \sqrt{T}$$
(106)

Здесь К - постоянный коэффициент, L - размер зерна, Т - температура.

Теперь рассмотрим захват свободного  $P_s$  примесями и ловушками разного рода в экситоном представлении. Вероятность захвата свободного  $P_s$ , находящегося на узле n' примесью, находящейся в узле  $\overline{n}_i$ , можно оценить по формуле [6]

$$W(\bar{n}',\bar{n}) = \frac{1}{\hbar} |V_{\bar{n},\bar{n}'}|^2 \left(\frac{\pi}{B}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{(\Delta_{\bar{n},\bar{n}'} + A_1)^2}{4B}\right]$$
(107)

Например, если  $2\sqrt{B} \approx 0,15$  эВ,  $(\Delta_{\overline{n},\overline{n}'} + A_1) \approx 0,5$  эВ,  $|V_{\overline{n},\overline{n}'}| \approx 0,15$  эВ,  $|\overline{n'} - \overline{n}| \approx a$ , то вероятность захвата  $W(\overline{n'},\overline{n} + \overline{a}) \approx 10^{10} c^{-1}$ ; если же  $2\sqrt{B} \approx 0,10$  эВ, то  $W(\overline{n'},\overline{n} + \overline{a}) \approx 10^3 c^{-1}$ ; то есть вероятность захвата изменяется в очень широких пределах.

По аналогии с экситоном можно считать, что захват локализованного *Ps* примесью практически отсутствует, если выполняется неравенство

$$\tau \cdot W(\overline{n}', \overline{n} + \overline{a}) \ll 1 , \qquad (108)$$

где  $\tau$  - время жизни локализованного Ps.

Если  $\tau \cdot W(\overline{n}', \overline{n} + \overline{a}) >> 1$ , то захват может происходить и на расстояниях, больших постоянной решетки. Например, если  $W(\overline{n}', \overline{n} + \overline{a}) \approx 10^{12} c^{-1}, \tau \approx 10^{-7} c$ , то захват, обусловленный диполь-дипольным взаимодействием, может происходить на расстояниях порядка  $[\tau \cdot W(\overline{n}', \overline{n} + \overline{a})]^{1/6} \approx 20$  постоянных решетки.

Для диффундирующего локализованного Ps для расчета сечения захвата введем сферу радиуса R с центром в примеси и будем считать, что Psзахватывается при расстояниях, меньших R. Согласно [6], величину R, выраженную в длинах постоянной решетки, можно оценить из формулы

$$R = \left[\tau \cdot W(\overline{n}', \overline{n} + \overline{a})\right]^{1/6} a \tag{109}$$

Отсюда сечение захвата

$$\sigma = 4\pi R^2 \tag{110}$$

Имеются основания полагать, что при переносе *Ps* определенную роль может играть механизм Фёрстера [6], связанный с переносом возбуждения, возникающего при действии *Ps* на среду, от одного атома к другому в кристалле.

В случае свободного *Ps* можно оценить захваты его мелкой и глубокой ловушками глубиной  $\Delta$ . В этом случае, если глубина ловушки  $\Delta$  мала по сравнению с  $k_B \theta \approx \hbar \omega_D$  ( $\theta$  – температура Дебая), то захват *Ps* может происходить с участием уже одного акустического фонона. При  $\Delta >> k_B \theta$  захват *Ps* ловушкой является многофононным процессом.

28

В первом случае сечение захвата *Ps* мелкой ловушкой определяется по формуле

$$\sigma_{i} = \frac{3 |F^{(1)}|^{2} a^{6}}{\pi \hbar^{2} v_{0} \overline{v}} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\hbar q v_{0}}{k_{B} T}\right) \right]^{-1}$$
(111)

Здесь  $\overline{v}$  – средняя групповая скорость Ps, причем

$$E\{\vec{k}\} - E_I \approx \Delta + \frac{3}{2}k_B T \tag{112}$$

При низких температурах  $\Delta > \frac{3}{2}k_{B}T$  и сечение захвата равно

$$\sigma_{i} \approx \frac{3|F^{(1)}|^{2} a^{3}}{\pi \hbar^{2} v_{0}} \left(\frac{\Delta}{\hbar v_{0}}\right)^{3} \left(\frac{m^{*}}{3k_{B}T}\right)^{1/2},$$
(113)

То есть сечение захвата возрастает с понижением температуры как  $T^{-1/2}$ .

При 
$$\Delta < \frac{3}{2}k_BT$$
  
 $\sigma_i \approx \frac{15|F^{(1)}|^2 a^6}{4\pi\hbar^2 v_0} \left(\frac{3}{2}\frac{k_BT}{\hbar v_0}\right)^3 \left(\frac{m^*}{3k_BT}\right)^{1/2},$ 
(114)

То есть в данной области температур сечение захвата с ростом T возрастает по закону  $T^{5/2}$ .

Для вероятности захвата *Ps* глубокой ловушкой при  $\Delta = E(\vec{k}) - E_l - \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\bar{\chi}} \omega_{\bar{\chi}} (q_{\bar{\chi}^1}^2 - q_{\bar{\chi}^2}^2)$ справедливо выражение

$$W = \frac{1}{\hbar} \left| \int \psi_1^*(\vec{r}, R_0^{(1)}) \hat{H}_0 \psi_2^*(\vec{r}, R_0^{(2)}) d\tau \right|^2 \left(\frac{\pi}{B}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{(\Delta - A_1)^2}{4B}\right]$$
(115)

Обозначение и значение параметров  $B, A_1$  дано в [6]. При этом сечение захвата равно

$$\sigma_i \sim \frac{W}{\bar{v}} N a^3, \tag{116}$$

где  $\overline{v}$  - средняя скорость *Ps*. Следует отметить, что в данном случае сечение захвата при больших  $\Delta$  существенно изменяется лишь при *T* >  $\theta$ 

$$\sigma_i \sim \exp(-Q/k_B T), \tag{117}$$

где

 $Q = (\Delta - A_1)/4A_1$  - энергия активации.

Заключение. Итак, мы рассмотрели свойства  $P_s$  малого радиуса в экситоном представлении. Решающее значение данной проблемы состоит в использовании многоэлектронного подхода. Наиболее удачной моделью  $P_s$  малого радиуса является использование экситонного представления Ванье системы  $P_s$  + кристалл. В рамках этой модели удается естественно обосновать приближение «тяжелого»  $P_s$  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.

#### Список литературы

- 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".
- 2. Ya.I. Frenkel // Phys. Rev. 1931. Vol. 37. P17, 1276.
- 3. R.E.Peierls. Ann. Phys. // 1932. 1932. Vol.13(5). P.905.
- 4. Я.И.Френкель. Избранные труды. Т.2. М.: Наука, 1958.
- 5. Р.Нокс. Теория экситонов. М: Мир, 1966.
- 6. В.М.Агранович. Теория экситонов. М: Наука, 1968.
- В.М.Агранович, В.Л.Гинзбург. Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов. М: Наука, 1979.
- Гольданский В.И., Прокопьев Е.П. Об аномалиях аннигиляции позитронов в ионных кристаллах // Письма в ЖЭТФ. 1966. Т.4. Вып.5. С.422--425.
- Прокопьев Е.П. Рѕ, локализованный в кристалле. М., 1983. 8 с. Деп. в ЦНИИ "Электроника". Р-3634. МРС ВИМИ "Техника, технология, экономика". 1983. №9. Сер. "О".
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.