

包含逃逸过程的正电子位错捕获模型*

熊良锐 龙期威

(中国科学院金属研究所, 中国科学院国际材料物理中心, 沈阳)

摘要

本文给出一个包含逃逸过程的正电子位错捕获模型, 附带讨论割阶通过位错捕获正电子的温度依赖性, 并找出正电子主要湮没在位错线上的起始温度。

一、引言

一般认为位错是一种浅捕获势阱^[1,2]。正电子在这种浅势阱中容易发生热逃逸现象, 而且正电子经过这种浅捕获之后仍可以过渡到更深的捕获, 如位错线上割阶的捕获。因此讨论正电子位错捕获时, 必须考虑: (1) 正电子由位错的逃逸效应; (2) 位错浅捕获对正电子湮没参数所产生的影响; (3) 位错作为正电子过渡到更深捕获(如割阶)的台阶作用。我们曾用上述的第二点和第三点来改进 Smedskjaer 的湮没图象^[2], 提出无逃逸正电子位错捕获模型和位错芯同单空位的开空间比 γ 的概念, 预言当正电子为 Cd 那样的六角晶系中的位错捕获时主要在位错芯上湮没^[3,4]。

最近, 我们和合作者^[5]通过垂直(1012)晶面加载锌单晶, 得到密度约 $10^{10}/\text{cm}^2$ 的长直位错(割阶浓度 $C_i < 10^{-3}\text{nm}^{-1}$), 在100K下测量, 两分量分析, 较长的寿命(即正电子在长直位错上湮没的寿命)为 $(177 \pm 2)\text{ps}$, 比100K下的体寿命高出近30ps, 且估算得 $\gamma \lesssim 0.40$, 与文献[4]中的推定值0.32接近。但在300K下测量时, 寿命谱分解不出两分量, 得到接近体寿命的单一值, 这是无逃逸的模型所不能解释的。因此本文给出一个包括逃逸过程的捕获模型, 并把逃逸速率与实验测量值联系起来, 进而讨论正电子湮没参数的温度依赖性等问题。

二、捕获模型

图1 表示注入到仅含位错与割阶的固体中

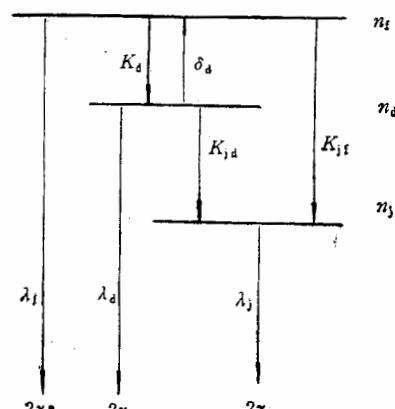


图1 正电子在仅含位错的固体中的湮没图象

本文1989年11月8日收到。

* 国家自然科学基金资助项目。

的正电子湮没图象,为了后面讨论方便,将割阶通过位错捕获的正电子与直接从自由态捕获正电子分开表示,并假定这两部分正电子之间不发生交换。

图1中可能的正电子态用水平线表示,连接这些态的垂直箭头表示捕获率或逃逸率,以 2γ 为终端的垂直箭头表示湮没率。

于是可列出下面的速率方程:

$$\dot{n}_f = -\lambda_f n_f - K_d n_f + K_{jf} n_f + \delta_d n_d = -\Gamma_f n_f + \delta_d n_d; \quad (1)$$

$$\dot{n}_d = -\lambda_d n_d - K_{jd} n_d + \delta_d n_d + K_d n_f = -\Gamma_d n_d + K_d n_f; \quad (2)$$

$$\dot{n}_j = -\lambda_j n_j + K_{jd} n_d + K_{jf} n_f. \quad (3)$$

这里

$$\Gamma_f = \lambda_f + K_d + K_{jf}; \quad (4)$$

$$\Gamma_d = \lambda_d + K_{jd} + \delta_d; \quad (5)$$

$$n_j = n_{jd} + n_{jf}. \quad (6)$$

式中脚标表示正电子状态,f 相应于自由态;d 相应于位错捕获态;j 相应于割阶捕获态;其中 jd 表示割阶通过位错的间接捕获,而 jf 表示割阶从自由态的直接捕获。n 是相应态所占据的几率;λ 是湮没率;K 是捕获率;δ 是逃逸率。将(6)式代入(3)式后,(3)式可分解为:

$$\dot{n}_{jd} = -\lambda_j n_{jd} + K_{jd} n_d; \quad (3a)$$

$$\dot{n}_{jf} = -\lambda_j n_{jf} + K_{jf} n_f. \quad (3b)$$

取 $t = 0$ 为正电子完全热化的时间,并假定正电子热化后处于自由态,即初始条件为:

$$n_f(0) = 1; \quad (7)$$

$$n_d(0) = n_j(0) = 0. \quad (8)$$

在方程求解的过程中定义:

$$\Gamma_{+-} = \frac{1}{2} [\Gamma_f + \Gamma_d \pm \sqrt{(\Gamma_f - \Gamma_d)^2 + 4\delta_d K_d}]. \quad (9)$$

为了强调 Γ_+ , Γ_- 分别与 Γ_f , Γ_d 的对应关系,引入一校正量 Δ ,使得

$$\Gamma_+ = \Gamma_f + \Delta; \quad (10)$$

$$\Gamma_- = \Gamma_d - \Delta; \quad (11)$$

$$\Delta = \frac{1}{2} [\sqrt{(\Gamma_f - \Gamma_d)^2 + 4\delta_d K_d} - (\Gamma_f - \Gamma_d)]. \quad (12)$$

得到方程(1)到(3)的解为:

$$n_f = \frac{\Gamma_f - \Gamma_d + \Delta}{\Gamma_f - \Gamma_d + 2\Delta} e^{-(\Gamma_f + \Delta)t} - \frac{\Delta}{\Gamma_f - \Gamma_d + 2\Delta} e^{-(\Gamma_d - \Delta)t}; \quad (13)$$

$$n_d = \frac{K_d}{\Gamma_f - \Gamma_d + 2\Delta} [e^{-(\Gamma_d - \Delta)t} - e^{-(\Gamma_f + \Delta)t}]; \quad (14)$$

$$n_j = \frac{K_d K_{jd} + K_{jf}(\Gamma_d - \lambda_j)}{(\Gamma_f + \Delta - \lambda_j)(\Gamma_d - \Delta - \lambda_j)} e^{-\lambda_j t} \\ + \frac{K_d K_{jd} - K_{jf}(\Gamma_f - \Gamma_d + \Delta)}{(\Gamma_f - \Gamma_d + 2\Delta)(\Gamma_f + \Delta - \lambda_j)} e^{-(\Gamma_f + \Delta)t}$$

$$\rightarrow \frac{K_d K_{jd} + K_{jf} \Delta}{(\Gamma_f - \Gamma_d + 2\Delta)(\Gamma_d - \Delta - \lambda_j)} e^{-(\Gamma_d - \Delta)t}. \quad (15)$$

在整个正电子湮没过程中, 各态湮没的强度分别为:

$$I_f = \int_0^\infty \lambda_f n_f(t) dt = \frac{\lambda_f}{\Gamma_f + \Delta} \frac{\Gamma_d}{\Gamma_d - \Delta}; \quad (16)$$

$$I_d = \int_0^\infty \lambda_d n_d(t) dt = \frac{K_d}{\Gamma_f + \Delta} \frac{\lambda_d}{\Gamma_d - \Delta}; \quad (17)$$

$$I_j = \int_0^\infty \lambda_j n_j(t) dt = \frac{K_d K_{jd} + K_{jf} \Gamma_d}{(\Gamma_f + \Delta)(\Gamma_d - \Delta)}. \quad (18)$$

(18)式中, I_j 又可分为 I_{jd} 与 I_{jf} , 且

$$I_{jd} = \int_0^\infty \lambda_j n_{jd}(t) dt = \frac{K_d K_{jd}}{(\Gamma_f + \Delta)(\Gamma_d - \Delta)}; \quad (19)$$

$$I_{jf} = \int_0^\infty \lambda_j n_{jf}(t) dt = \frac{K_{jf} \Gamma_d}{(\Gamma_f + \Delta)(\Gamma_d - \Delta)}. \quad (20)$$

(16), (17) 和 (18) 式满足

$$I_f + I_d + I_j = 1. \quad (21)$$

通常实验测得的正电子寿命谱可以用解(13)–(15)来表示:

$$\begin{aligned} S(t) &= \lambda_f n_f(t) + \lambda_d n_d(t) + \lambda_j n_j(t) \\ &= \sum_{i=1}^3 I_i \frac{1}{\tau_i} e^{-(\frac{1}{\tau_i})t}. \end{aligned} \quad (22)$$

方程(22)是三个指数衰减项之和, 称之为三个分量。式中的 τ_i 和 I_i 分别称为这三个分量的寿命和强度, 并有下列关系

$$\tau_1 = \frac{1}{\Gamma_f + \Delta} = \frac{1}{\lambda_f + K_d + K_{jf} + \Delta}, \quad (23)$$

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{1}{(\Gamma_f + \Delta)(\Gamma_f - \Gamma_d + 2\Delta)} \left[\lambda_f (\Gamma_f - \Gamma_d + \Delta) \right. \\ &\quad \left. - \lambda_d K_d + \lambda_j \frac{K_d K_{jd} - K_{jf} (\Gamma_f - \Gamma_d + \Delta)}{\Gamma_f + \Delta - \lambda_j} \right]; \end{aligned} \quad (24)$$

$$\tau_2 = \frac{1}{\Gamma_d - \Delta} = \frac{1}{\lambda_d + K_{jd} + \delta_d - \Delta}, \quad (25)$$

$$\begin{aligned} I_2 &= \frac{1}{(\Gamma_d - \Delta)(\Gamma_f - \Gamma_d + 2\Delta)} \left[\lambda_f \Delta + \lambda_d K_d \right. \\ &\quad \left. - \lambda_j \frac{K_d K_{jd} + K_{jf} \Delta}{\Gamma_d - \Delta - \lambda_j} \right]; \end{aligned} \quad (26)$$

$$\tau_3 = \frac{1}{\lambda_j}, \quad (27)$$

$$I_3 = \frac{K_d K_{jd} + K_{jf} (\Gamma_d - \lambda_j)}{(\Gamma_f + \Delta - \lambda_j)(\Gamma_d - \Delta - \lambda_j)}. \quad (28)$$

将(26)、(28)式代入(24)式, 可计算得:

$$\lambda_f = (\Gamma_f + \Delta) I_1 + (\Gamma_d - \Delta) I_2 + \lambda_j I_3 = I_1 / \tau_1 + I_2 / \tau_2 + I_3 / \tau_3$$

有时仅用一个平均寿命来表示这种谱,根据定义并将(23)一(28)代入,计算得:

$$\begin{aligned}\tau_M &\equiv \tau_1 I_1 + \tau_2 I_2 + \tau_3 I_3 \\ &= \frac{1}{\Gamma_f + \Delta} \left\{ 1 + \frac{K_d}{\Gamma_d - \Delta} \left[1 + \frac{K_{jd}}{\lambda_j} + \frac{\Delta}{K_d} \left(1 + \frac{K_{jf}}{\lambda_j} \right) \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{K_{jf}}{\lambda_j} \right\}. \quad (29)\end{aligned}$$

这样将实验测量量与模型量联系起来了。

三、逃逸对各量的影响

首先考虑逃逸对 Δ 的影响。可以把 Δ 分为两部分,即:

$$\Delta = (\Gamma_d - \Gamma_f) \theta(\Gamma_d, \Gamma_f) + \Delta', \quad (30)$$

这里

$$\theta(\Gamma_d, \Gamma_f) = \begin{cases} 0 & \Gamma_d \leq \Gamma_f \\ 1 & \Gamma_d > \Gamma_f \end{cases} \quad (31)$$

是引入的阶跃函数。因此这两部分分别为

$$(\Gamma_d - \Gamma_f) \theta(\Gamma_d, \Gamma_f) = \frac{1}{2} [|\Gamma_f - \Gamma_d| - (\Gamma_f - \Gamma_d)]; \quad (32)$$

$$\Delta' = \frac{1}{2} [\sqrt{(\Gamma_f - \Gamma_d)^2 + 4\delta_d K_d} - |\Gamma_f - \Gamma_d|]. \quad (33)$$

Δ' 是一个小的正值,当逃逸率 δ_d 为零时它为零。它随着 δ_d 的变化如图2所示。图2中取 $\lambda_f = 6.1(\text{ns})^{-1}$; $\lambda_d = 5.5(\text{ns})^{-1}$ ^[6]; $\lambda_j = 4.1(\text{ns})^{-1}$ 和 $K_d = K_{jf} = K_{jd} = 1(\text{ns})^{-1}$ (近似形变Al低温退火后的情况),图中也画出了 Γ_f , Γ_d , Γ_+ , Γ_- 同 δ_d 的关系。由(10)、(11)、(30)式可得

$$\Gamma_+ = \Gamma_f + (\Gamma_d - \Gamma_f) \theta(\Gamma_d, \Gamma_f) + \Delta'; \quad (34)$$

$$\Gamma_- = \Gamma_d - (\Gamma_d - \Gamma_f) \theta(\Gamma_d, \Gamma_f) - \Delta'. \quad (35)$$

在逃逸很小时,一般有 $\Gamma_f > \Gamma_d$,因此有 $\Gamma_+ = \Gamma_f + \Delta'$; $\Gamma_- = \Gamma_d - \Delta' = \lambda_d + K_{jd} + \delta_d - \Delta'$ 。也就是说在 $\Gamma_f > \Gamma_d$ 的条件下,与 Γ_f 相关联的量为 Γ_+ ,它随 δ_d 的增大而增大;与 Γ_d 相关联的量为 Γ_- ,它一方面随 δ_d 本身的增大而增大,另一方面却随 Δ' 的增大而减小,总的效果还是略有增大。 Γ_d 随 δ_d 增

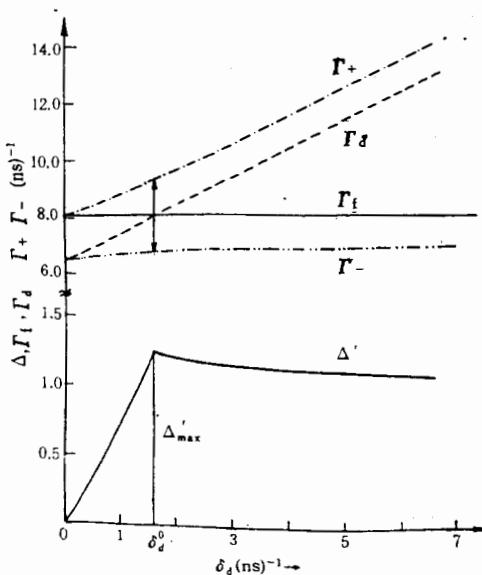


图2 Δ' , Γ_f , Γ_d , Γ_+ , Γ_- 随 δ_d 的变化(说明见正文)

大，当达到 $\Gamma_d = \Gamma_f$ 时， Δ' 达到极大值， $\Delta'_{\max} = \sqrt{\delta_d^0 K_d}$ （这里 δ_d^0 表示 $\Gamma_d = \Gamma_f$ 时的 δ_d 值）。 δ_d 超过 δ_d^0 后，则有 $\Gamma_d > \Gamma_f$ ，由(34)、(35)式得到： $\Gamma_+ = \Gamma_d + \Delta'$ ； $\Gamma_- = \Gamma_f - \Delta'$ 。于是与 Γ_f 相关联的量由原来的 Γ_+ 变为 Γ_- ，而与 Γ_d 相关联的量则由原来的 Γ_- 变为 Γ_+ 。当达到完全逃逸的极限情况时， $\Delta' = K_d$ ，则 $\Gamma_+ = \Gamma_f - K_d = \lambda_f + K_{jf}$ ，也就不存在位错的捕获效应了。

(29) 当存在逃逸时，实验测量的诸分量除 τ_3 不变外，都发生相应变化。随着逃逸增加，各量的变化如图3所示。图3中 λ_f 、 λ_d 、 λ_j 、

K_d 、 K_{jd} 和 K_{jf} 的相应值和图2中的相同。

由图3看到随着逃逸率 δ_d 的增加，(1) τ_1 和 I_1 迅速下降并趋于零；(2) τ_2 缓慢下降并趋于 $1/(\lambda_f + K_{jf})$ ，但 I_2 逐渐增加并趋于 $\frac{\lambda_f - \lambda_j}{\lambda_f + K_{jf} - \lambda_j}$ ；(3) τ_3 为常量， I_3 稍有下降

(30) (31) 但变化非常小，并趋于 $\frac{K_{jf}}{\lambda_f + K_{jf} - \lambda_j}$ 。

(32) 四、割阶通过位错捕获正 电子的温度依赖性

(33) 将割阶从自由态直接捕获的正电子数与通过位错间接捕获的正电子数之比定义为 α ，则

$$\alpha = \left[\int_0^\infty K_{jf} n_f dt \right] / \left[\int_0^\infty K_{jd} n_d dt \right] = \Gamma_d K_{jf} / [K_d K_{jd}] . \quad (36)$$

用 Smedskjaer 等^[2] 和 Path 等^[3] 提出的模型来考虑 K_d 、 δ_d 的温度依赖性。 K_d 可近似表示为：

$$K_d(T) = K_0 e^{-\gamma T} = \gamma_0 D e^{-\gamma T} . \quad (37)$$

当给定正电子-位错键能 E_b 时， K_0 和 γ 是常数， γ_0 是在 0°K 时位错对正电子的比捕获率； D 是位错密度。对 $\delta_d(T)$ 他们得到：

$$\delta_d(T) = \frac{m}{4\hbar^2} \pi^{-1/2} D^{-1} K_d(T) (k_B T)^{3/2} E_b^{-1/2} e^{-E_b/k_B T} , \quad (38)$$

这里 m 是电子的质量； \hbar 是普朗克常数； k_B 是玻尔兹曼常数。

我们曾提出^[3,4]

$$K_{jd} = f v C_j \quad (39)$$

这里 C_j 是单位长度位错线上割阶的数目， f 是正电子通过割阶时被割阶捕获的效率， v 是正电子沿位错线运动时的平均速度，且^[8]

$$v \approx \sqrt{\frac{8}{\pi m} k_B T} , \quad (40)$$

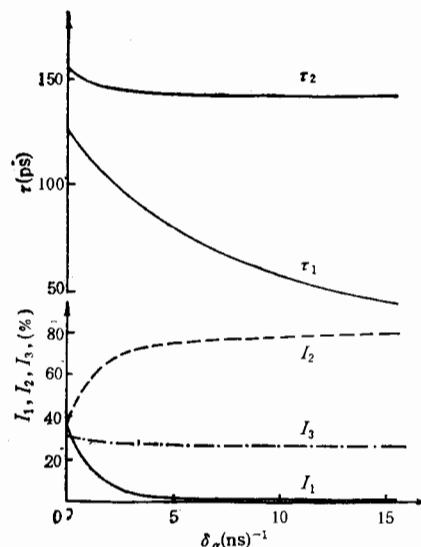


图3 $\tau_1, \tau_2, I_1, I_2, I_3$ 随 δ_d 的变化

$$K_{jd}(T) = f \left(\frac{8}{\pi m} k_B \right)^{1/2} C_j T^{1/2}. \quad (41)$$

割阶直接从自由态捕获正电子的捕获率具有与空位捕获相同的量级，并是跃迁机制，且以电子空穴对为媒介，所以本质上 K_{jf} 是与温度无关的。Smedskjaer 等^[2]曾得到：

$$K_{jf} = \mu_v \Omega D C_j. \quad (42)$$

这里 μ_v 是自由正电子在空位处的比捕获率， Ω 是原子体积。

现在可以由(36)–(42)式来考虑 α 的温度依赖性：

$$\alpha(T) = \frac{K_{jf} [\lambda_d + K_{jd}(T) + \delta_d(T)]}{K_d(T) K_{jd}(T)}. \quad (36')$$

按照方程 (36')， $\alpha(T)$ 随温度 T 的变化如图 4 所示，随着温度降低， $\alpha(T)$ 迅速下降，最后达到一个小于 1 的较稳定的值。这样，可以定义一个临界温度 T_c ，使 $\alpha(T_c) = 1$ 。在 T_c 温度下，割阶直接从自由态捕获正电子的数目与它通过位错间接捕获的正电子

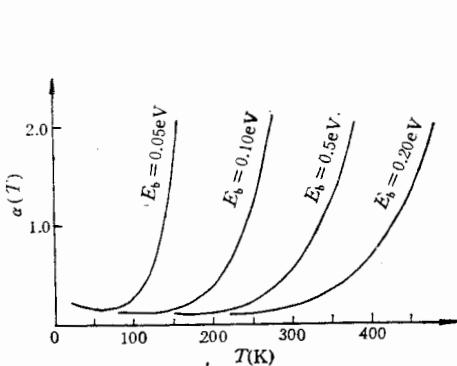


图 4 α 与温度的关系

图中取 $\lambda_d = 5.5 \text{ ns}^{-1}$; $D = 10^8 \text{ cm}^{-2}$;
 $\mu_v = 10^{13} \text{ s}^{-1} \text{ atom}^{-1}$; $C_j = 10^{-7} \text{ nm}^{-1}$;
 $v_0 = 0.1 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$

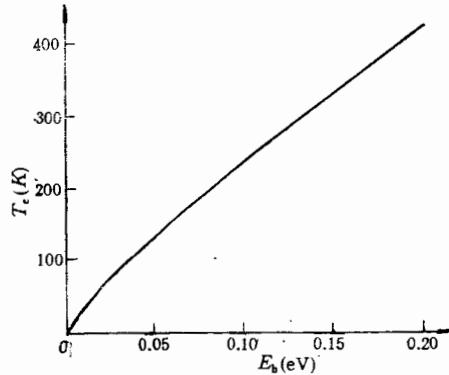


图 5 $\alpha(T_c) = 1$ 定义的临界温度 T_c 与正电子位错键能 E_b 之间的关系
 $(\lambda_d \text{ 等的取值与图 4 相同})$

数目相等。当 $T > T_c$ 时，割阶主要是直接从自由态捕获正电子；当 $T < T_c$ 时，割阶主要是通过位错来捕获正电子。对于不同的物质有不同的临界温度 T_c 值。 T_c 与正电子位错键能 E_b 的关系如图 5 所示，图中随着 E_b 的增大， T_c 近乎线性地升高。

一般 T_c 总是低于室温 T_R ，因此在室温下割阶主要是直接从自由态捕获正电子，位错捕获到的正电子存在严重的逃逸现象，而使得 $I_d(T_R) \approx 0$ ，故在常温下很难表现出位错捕获现象。

五、 λ_d 在寿命测量中起作用的条件和初始温度

与位错相关的衰变率 $\Gamma_d = \lambda_d + K_{jd} + \delta_d$ ，式中三项代表了位错的三种作用。 λ_d 代表正电子在位错线自身湮没所产生的影响； K_{jd} 代表位错线有过渡到更深捕获的台阶

作用； δ_d 代表正电子从位错中的逃逸作用。将(41)、(38)式代入，即得到 Γ_d 的温度依赖性：

$$\begin{aligned}\Gamma_d(T) = & \lambda_d + f \left(\frac{8}{\pi m} k_B \right)^{1/2} C_j T^{1/2} \\ & + \frac{m}{4\hbar^2} \pi^{-1/2} D^{-1} K_d(T) (k_B T)^{3/2} E_B^{-1/2} e^{-E_B/k_B T}.\end{aligned}\quad (5')$$

随着温度降低， $\delta_d(T)$ 、 $K_{jd}(T)$ 逐渐削弱，甚至消失，而 λ_d 则相对增强。如果温度降低到 T_i 时，存在 $\lambda_d = K_{jd}(T_i) + \delta_d(T_i)$ ，就定义 T_i 为 λ_d 起主要作用的初始温度。当 $T < T_i$ 时，则 $\lambda_d > K_{jd}(T) + \delta_d(T)$ 。一般由于温度 T_i 很低，会满足 $\delta_d(T_i) \ll K_{jd}(T_i)$ 。因此近似地有

$$\lambda_d \approx f \left(\frac{8}{\pi m} k_B \right)^{1/2} C_j (T_i)^{1/2}. \quad (43)$$

整理可得：

$$T_i \approx A(\lambda_d L)^2. \quad (44)$$

这里 $L = 1/C$ 是割阶的平均间距； $A = \frac{\pi m}{8k_B f^2}$ 应是常数。为了估计 T_i 的量级，取 $\lambda_d = 6.0(\text{ns})^{-1}$ ， $L = 10^4 \text{nm}$ （相当于充分退火金属）， $f = 0.7$ ，则 $T_i \approx 190 \text{K}$ ，接近于预空位现象出现的温度^[9]。由(44)式可以预言，对 λ_d 较高且 L 较长的材料其 T_i 会较高。一般说来， c/a 大于 1.632 的六角晶系材料，如 Zn、Cd 等， L 会比立方晶系的长得多^[1,5]，其 T_i 应比立方晶系的高。如果预空位现象是由于正电子在位错线上湮没引起的，则在 Zn、Cd 等材料中预空位现象出现的温度也就会较高。

作者之一(熊良铖)对意大利 A. Dupasquier 教授，A. Zecca 教授给予的有益讨论表示衷心感谢。

参 考 文 献

- [1] M. Doyama and R. M. J. Cotterill, Proc. 5th Int. Conf. on Positron Annihilation, (1979) Lake Yamanaka, Japan, p. 89.
- [2] L. C. Smedskjaer, M. Manninen and M. J. Fluss, *J. Phys.*, F10(1980), 2237.
- [3] L. Y. Xiong, *Chinese Phys. Lett.*, vol.3, No.5(1986), 237.
- [4] 熊良铖：高能物理与核物理，12(1988), 433; or *High Energy Physics & Nuclear Physics*, V12 N1(1988), 9.
- [5] Shi Dan, L. Y. Xiong, C. W. Lung: Positron—Dislocation Interaction Studied in Deformed Zinc Single Crystal. (to be published in *J. Phys.: Condens. Matter*)
- [6] J. Q. Shen, C. W. Lung, K. L. Wang, Proc. 7th Int. Conf. on Positron Annihilation, (1985) New Delhi, India, p. 592.
- [7] B. Path, H. E. Hansen, B. Nielsen, G. Trumpp and Petersen, *Appl. Phys.*, A33(1982), 225.
- [8] C. Cao, Y. Y. Wang, X. M. Xiong, L. Y. Xiong, J. Jiang, Proc. 6th Int. Conf. on Positron Annihilation, (1982) Arlington U. S. A., p. 473.
- [9] R. N. West, in *Positron in Solids*, edited by P. Hautojärvi, *Topics in Current Physics*, v.12 (Berlin, 1979), 88.

POSITRON DISLOCATION TRAPPING MODEL INCLUDING THE EFFECTS OF DETRAPPING OF POSITRON FROM DISLOCATIONS

XIONG LIANGYUE LONG QIWEI

(Institute of Metal Research, Academia Sinica, Shenyang)

(International Centre for Material Physics, Academia Sinica, Shenyang)

ABSTRACT

A positron dislocation trapping model which considers the effects of positron detrapping from dislocations is given. The temperature dependence on α (the ratio between the number of positrons trapped directly from bulk into jogs and that of positrons trapped indirectly passing through the dislocation channel from bulk into jogs) and the initial temperature T_i that positrons are mainly annihilated at dislocation lines are discussed.