

# Pokroky matematiky, fyziky a astronomie

---

Jan Adam; Antonín Čížek

Anihilace pozitronů v kovech a slitinách

*Pokroky matematiky, fyziky a astronomie*, Vol. 14 (1969), No. 5, 207--220

Persistent URL: <http://dml.cz/dmlcz/138913>

## Terms of use:

© Jednota českých matematiků a fyziků, 1969

Institute of Mathematics of the Academy of Sciences of the Czech Republic provides access to digitized documents strictly for personal use. Each copy of any part of this document must contain these *Terms of use*.



This paper has been digitized, optimized for electronic delivery and stamped with digital signature within the project *DML-CZ: The Czech Digital Mathematics Library* <http://project.dml.cz>

## ANIHILACE POZITRONŮ V KOVECH A SLITINÁCH

JAN ADAM, ANTONÍN ČÍŽEK, Brno

## ÚVOD

Objev pozitronu ANDERSONEM v roce 1932 vedl k zavedení nové metody studia elektronové struktury látek. Je to metoda pozitronové anihilace. Jako první jí použili v roce 1942 BERINGER a MONTGOMERY [1]. Měřili úhlové rozdělení fotonů vzniklých při anihilaci pozitronů s elektrony mědi a olova a zjistili, že elektronová dvojice, *pozitron-elektron*, má kinetickou energii menší než několik keV. Přitom dvojice fotonů byly emitovány v opačných směrech s odchylkou menší než  $1^\circ$  od přímého úhlu [2].

Od padesátých let se měřicí technika zdokonalila natolik, že byly shromážděny četné experimentální výsledky. Tak DE BENEDETTI aj. [3] proměřili úhlové rozdělení anihilačních fotonů ve zlatě, analyzovali jeho tvar v oblasti vyšších hybností elektronového páru a došli k závěru, že se na anihilaci podílejí valenční elektrony. VLASOV aj. [4] vyslovili názor, že spektrum hybnosti volných elektronů má za jistých okolností parabolický tvar. LANG aj. [5] potvrdili tento názor experimentálně a také měření STEWARTOVA [6] provedená na 34 kovech vedla ke stejnému závěru. Od té doby se začíná pozitronové anihilace používat ve stále větším měřítku ke studiu elektronové struktury tuhých látek, zejména kovů a slitin.

Experimentální výsledky byly podrobně rozpracovány i z teoretického hlediska [7]. Zájem se soustředil na střední dobu života pozitronu, protože poskytuje informace o interakci pozitronu s elektronem. Prvá měření provedli roku 1952 DE BENEDETTI a RICHINGS [8]. Měření ukázala, že doba života pozitronů v kovech je přibližně stejná,  $1,5 \cdot 10^{-10}$  s.

V současné době přechází pozitronová anihilace k řešení složitějších otázek fyziky kovů: Stanoví tvar Fermiho plochy, sleduje vliv plastické deformace, teploty a fázových přeměn na tvar anihilačních křivek, vyšetřuje polarizaci elektronů ve feromagnetických látkách, studuje elektronovou strukturu přechodných kovů a slitin aj.

V článku nastíníme hlavní výsledky těchto směrů, poněvadž jsou dosud rozptýleny po literatuře a jen některé z nich sledoval SEDOV [9] a DĚCHŤAR [10]. Základní problematiku shrneme stručně, neboť je dostatečně zachycena v několika přehledných člancích [11 – 15].

## ÚHLOVÉ ROZDĚLENÍ ANIHILAČNÍCH FOTONŮ

Setká-li se pozitron s elektronem, dochází k zániku obou částic neboli k *anihilaci* elektronového páru; přitom vznikají zpravidla dva fotony o energii 0,511 MeV.

Anihilaci elektronového páru vysvětluje Diracova teorie volného elektronu. Relativistické zobecnění Schrödingerovy rovnice, *Diracova rovnice*, připouští totiž jako řešení i stavy, kdy celková energie elektronu zahrnující klidovou energii je záporná. Přitom existuje mezi zápornými a kladnými hladinami interval  $\langle -m_0c^2, +m_0c^2 \rangle$  zakázaných energií;  $m_0$  je klidová hmotnost elektronu,  $c$  je rychlost světla. Dirac předpokládal, že všechny záporné stavy (interval  $\langle -\infty, -m_0c^2 \rangle$ ) jsou obsazeny elektrony. Získá-li elektron záporné hladiny energii větší než 1,02 MeV, přejde přes zakázaný pás do oblasti kladných energií a obsadí prázdný stav. Tím uvolní jeden záporný stav a vzniklá „díra“, *pozitron*, se chová jako částice s kladným nábojem a hmotou rovnou hmotě elektronu. Opačný proces, přechod elektronu z kladné hladiny na zápornou, *anihilace*, probíhá samovolně, neboť jde o přechod do nižšího energetického stavu.

Zákony zachování energie a hybnosti vedou při anihilaci ke vztahům mezi směry šíření fotonů a jejich hybnostmi,  $\mathbf{p}$ , popř. vlnovými vektory,  $\mathbf{k}$ . Necht  $\mathbf{p}_\perp$  je složka hybnosti hmotného středu elektronového páru do směru kolmého a  $\mathbf{p}_\parallel$  do směru rovnoběžného ke směru emise anihilačních fotonů, jež mají vlnové vektory  $\mathbf{k}_1$  a  $\mathbf{k}_2$  (obr. 1). Složka  $\mathbf{p}_\perp$  vyvolává odklon od úhlu  $\pi$ , tj. od antiparalelního směru obou



Obr. 1. Rozklad vektoru hybnosti anihilující dvojice.

fotonů, a složka  $\mathbf{p}_\parallel$  způsobuje Dopplerův posuv. (Byl zjištěn v roce 1949 DU MONDEM aj. [16] u mědi a činil asi 16 eV.) Poněvadž kinetická energie anihilujících částic je velmi malá proti klidové energii elektronu  $m_0c^2$ , platí pro úhlovou odchylku  $\Theta$  od přímého směru vztah

$$(1) \quad \sin \Theta \doteq \Theta = \mathbf{p}_\perp / m_0 c .$$

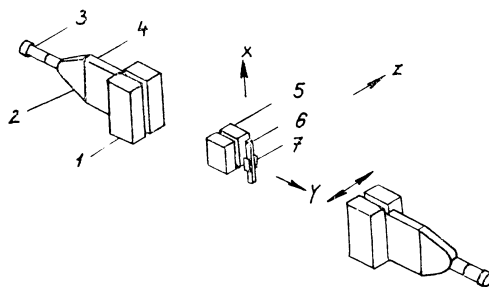
Dopplerovská změna frekvence anihilačních fotonů  $\Delta\omega$  je dána rovnicí

$$(2) \quad \Delta\omega = \mathbf{p}_\parallel c / \hbar ;$$

$\hbar$  je Planckova konstanta.

Měření rozdílu energie  $\Delta E = \hbar\Delta\omega$  podle vztahu (2) je obtížné [16], a proto se dopplerovského posuvu ke stanovení hybnosti neužívá. Zato měření úhlového rozdělení  $N(\Theta)$  anihilačních fotonů je poměrně snadné. Podle vztahu (1) vede ke stanovení hybnosti elektronů a stalo se základem metody pozitronové anihilace. Tato metoda je v současné době nejjednodušší metodou studia elektronové struktury látek vůbec.

Schéma experimentálního uspořádání pro pozitronovou anihilaci je zachyceno na obr. 2: Pozitrony z radioaktivního sodíku Na 22 nebo mědi Cu 64 aj. dopadají na vzorek zkoumané látky a anihilují s jejími elektrony. Kolmo na směr dopadajícího svazku jsou umístěny proti sobě ve stejných vzdálenostech od vzorku dva detektory záření gamma, které zachycují anihilační fotony vymezené dvěma štěrbinami v olověných blocích. Detektory (scintilační krystaly, zpravidla jodid sodný aktivovaný thaliem) jsou spojeny s fotonásobiči, z nichž jsou elektrické pulsy vedeny po zesílení do koincidenčního zařízení s rozlišovací dobou  $10^{-6}$  až  $10^{-7}$  s. Úhlové rozdělení anihilačních fotonů se získá měřením počtu koincidencí za určitou dobu, zpravidla v závislosti na úhlu pootočení jednoho detektoru kolem osy procházející vzorkem a rovnoběžné se štěrbinami.



Obr. 2. Schéma zařízení pro měření úhlového rozdělení anihilačních fotonů [9]: 1 — clona, 2 — světlovod, 3 — fotonásobič, 4 — scintilační krystal, 5 — pomocná štěrbina, 6 — vzorek, 7 — zdroj pozitronů.

Emitované pozitrony mají kinetickou energii řádu 1 MeV. Srážkami s elektrony a ionty kovu jejich rychlost prudce klesá na termickou rychlost plynu v době  $3 \times 10^{-12}$  s [17], která je asi o dva řády menší než střední doba života pozitronu v kovu. Touto termalizací klesne energie pozitronu na hodnotu tepelné energie při pokojové teplotě (0,025 eV) a je zanedbatelná proti energii elektronu v kovu (několik eV). Proto k hybnosti hmotného středu anihilující dvojice přispívá prakticky pouze elektron.

Předpokládáme-li, že pravděpodobnost anihilace nezávisí na relativní rychlosti obou částic, můžeme popsat úhlové rozdělení  $N(\Theta)$  vztahem

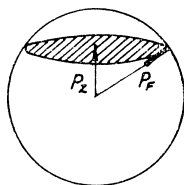
$$(3) \quad N(\Theta) = A \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} n(p_x, p_y, p_z) dp_x dp_y ;$$

$\Theta = p_z/m_0c$ , konstanta  $A$  závisí pouze na parametrech přístroje a  $n(p_x, p_y, p_z)$  je rozdělovací funkce hybnosti elektronů. Vztah (3) vyplývá z experimentálního uspořádání, neboť ve směru  $x$  štěrbin jsou registrovány všechny složky  $p_x$  (v důsledku délky štěrbin) i  $p_y$  (scintilační krystal není citlivý na dopplerovský posuv).

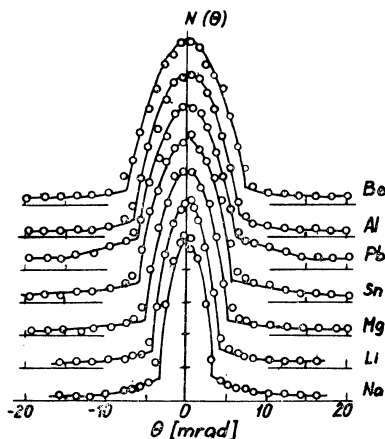
Považujeme-li elektrony v kovu za ideální Fermiho plyn, zaplňují elektrony všechny stavy uvnitř Fermiho koule, která vymezuje v hybnostním prostoru hranici největší hybnosti vodivostních elektronů (obr. 3). Uvnitř koule je potom rozdělovací funkce  $n(p_x, p_y, p_z) = 1$  a vně koule  $n(p_x, p_y, p_z) = 0$ . Ze vztahu (3) plyne výsledek

$$(4) \quad N(\Theta) = A(p_F^2 - p_z^2);$$

$p_F$  značí poloměr Fermiho koule. V této aproximaci má tedy anihilační spektrum tvar paraboly a průsečík s osou úseček udává Fermiho hybnost  $p_F$ . Z obr. 3 je patrné, že výraz (4) je úměrný ploše řezu, který utíná na Fermiho kouli rovina kolmá k ose  $z$  ve vzdálenosti  $p_z$  od středu koule.



Obr. 3. Řez Fermiho kouleí.



Obr. 4. Anihilační spektra některých kovů podle LANGA [5].

Parabolický tvar anihilačního spektra vodivostních elektronů vyplývá z kulového tvaru Fermiho plochy a lze jej pozorovat u všech polykrystalických kovů; u monokrystalů je Fermiho koule zpravidla nahrazena Fermiho plochou, která bývá složitá. U polykrystalů se měří průměrná hodnota ze všech orientací, a proto se získá hodnota, která je stejná ve všech směrech.

Na obr. 4 jsou zakreslena anihilační spektra několika polykrystalických kovů podle LANGA aj. [5]. Je patrné, že naměřenými body lze proložit paraboly až do Fermiho hybnosti  $p_F$ . Tím však křivky nekončí, ale nad touto hybností mají výběžky, jež mohou být způsobeny těmito příčinami:

1. pozitrony jsou nedostatečně termalizovány,
2. uplatňuje se rozlišovací schopnost přístroje,
3. působí polarizace elektronového plynu,
4. uplatňuje se interakce vodivostních elektronů s mřížkou a
5. pozitrony anihilují také s elektrony vrchních slupek iontového zbytku.

První příčinu lze vyloučit na základě teoretických výpočtů doby termalizace v ko-

vech. Může se uplatnit pouze při nízkých teplotách u některých kovů, např. hliníku [18].

Také druhá příčina nepřipadá v úvahu, neboť přístroje s vysokou rozlišovací schopností (0,3 až 0,8 mrad) ukázaly, že se tvar vyšší složky nemění. U horších rozlišení lze tento vliv korigovat.

Polarizace elektronového plynu byla řešena mnohačasticovou interakcí [19, 20]. Bylo zjištěno, že v blízkosti pozitronu dochází vlivem coulombovských sil až k tří-náctinásobnému zvýšení hustoty elektronového plynu. Tím se mění doba života pozitronů, ale úhlové rozdělení anihilačních fotonů není téměř dotčeno. Tedy ani polarizace elektronového plynu nevyvolává vznik výběžků.

Interakci vodivostních elektronů s mřížkou lze zjistit pomocí jednočasticové teorie [14]. Pro vlnový vektor vodivostních elektronů v blízkosti Brillouinovy zóny jsou totiž možná řešení Schrödingerovy rovnice obsahující hybnosti vyšších řádů, které jsou určeny násobky vektoru reciproké mřížky. Avšak ani tím nelze vznik výběžků zcela vysvětlit.

Poslední příčina se zdá nejvýznamnější. V kovech, v nichž ionty zaujímají značnou část krystalu, uplatňuje se totiž ve větší míře anihilace pozitronů s elektrony nejvyšších vnitřních slupek, s *vázanými elektrony*; coulombovské pole jádra zabraňuje termalizovaným pozitronům proniknout hlouběji do iontového zbytku.

Na základě předcházejícího rozboru můžeme tvrdit: Vyšší hybnostní složka je v převážné míře důsledkem anihilace pozitronů s vázanými elektrony, interakce vodivostních elektronů s mřížkou se na ní podílí velmi málo a ostatní příčiny lze prakticky vyloučit.

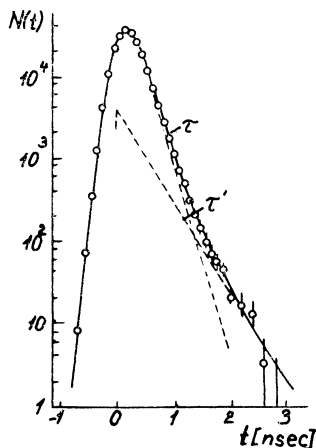
Kovy se rozdělují podle velikosti výběžků na dvě skupiny [12, 14]. Do první se zařazují alkalické kovy, Be, Cd, In, Ca ad., jejichž anihilační spektra mají zřetelně parabolický tvar a nepatrné výběžky. Ve druhé skupině jsou vzácné a přechodné kovy, u nichž jsou výběžky velmi výrazné.

## DOBA ŽIVOTA POZITRONŮ V KOVECH

Měření doby života pozitronů má velký význam pro studium chemické vazby u nekovových látek. U kovů poskytují tato měření informace především o polarizačních jevech vyvolaných přítomností pozitronů v elektronovém plynu. Rovněž vliv vázaných elektronů na střední dobu života pozitronů nelze zcela zanedbat.

Měření doby života pozitronů spočívá ve stanovení závislosti počtu koincidencí na zpoždění (nastavuje se zpožďovací linkou), kterému jsou vystaveny všechny pulsy jednoho z detektorů. Zdroj pozitronů bývá vložen mezi fólie vzorku. Vznik pozitronů v izotopu Na 22 je provázen současným vyzářením kvanta gamma o energii 1,28 MeV (určuje okamžik vzniku pozitronu) a zánik se projeví vyzářením anihilačních fotonů. Nastavením diskriminátoru lze dosáhnout toho, že jeden z detektorů registruje fotony s energií 1,28 MeV a druhý s energií 0,511 MeV. Protože foton s energií 1,28 MeV

předchází anihilaci, zpožďuje se jeho puls a vede se do koincidenčního zařízení, v němž koinciduje s pulsem vyvolaným anihilačním fotonem (koincidenční interval se volí  $10^{-9}$  s). Na obr. 5 je vynesena koincidenční křivka pro hliník [21]. Na vodorovné ose je uveden logaritmus času a na svislé ose je uveden logaritmus počtu koincidencí a na vodorovné dobu zpoždění. Je vidět, že pravou polovinou křivky od maxima lze proložit dvě přímky. Jejich směrnice určují střední dobu života pozitronů. Intenzita druhé komponenty  $\tau'$  v hliníku, lithiu, sodíku a mědi nepřesahuje zpravidla 6,5% celkového počtu koincidencí a byla pokládána za důkaz *pozitronia* v kovech. Teprve nedávná měření WEISBERGOVA [22] ukázala, že její výskyt lze vysvětlit přípravou a stavem povrchu kovového vzorku.



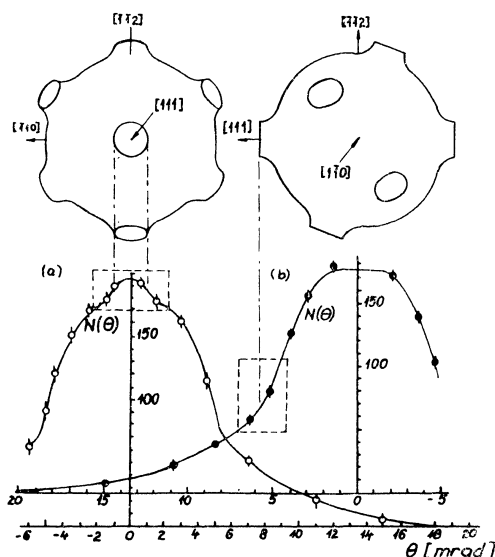
Obr. 5. Křivka zpožděných koincidencí charakterizující střední dobu života pozitronů v hliníku podle BELLA a JØRGENSENA [21]:  $\tau = 1,93 \cdot 10^{-10}$  s,  $\tau' = 3,85 \cdot 10^{-10}$  s.

Výskyt dvou komponent s různou dobou života pozitronů svědčí zpravidla o zániku pozitronia, tj. soustavy pozitronu s elektronem, která je uspořádána jako atom vodíku. Pozitronium má buď antiparalelní spiny obou částic (toto *parapozitronium* má dobu života  $\tau_1 = 1,25 \cdot 10^{-10}$  s) nebo paralelní spiny (*ortopozitronium* s dobou života  $\tau_2 = 1,41 \cdot 10^{-10}$  s). Pozitronium vzniká v látkách s nízkou elektronovou hustotou. Kovy mají elektronovou hustotu poměrně vysokou, a proto v nich pozitronium nevzniká. Není splněna podmínka  $r_s \geq 8,6$ , charakterizující elektronovou hustotu v látce;  $r_s$  je poloměr koule vyjádřený v Bohrových jednotkách, která obsahuje jediný valenční elektron, a u kovů  $r_s = 1,8 - 5,5$ .

Teorie volných elektronů dává střední doby života několikrát delší, než jsou naměřené hodnoty. Je to důsledek toho, že zanedbává coulombovskou interakci pozitronů s elektrony, která zvyšuje lokální elektronovou hustotu v okolí pozitronu. Tento vliv bere v úvahu teorie KAHANOVA [19] a u jednoduchých kovů dochází k dobrému souhlasu s měřením. U přechodných kovů však nestačí ani započtení coulombovské interakce, aby výsledky výpočtů souhlasily uspokojivě s měřením. Anihilace probíhá totiž ještě rychleji, než odpovídá lokální hustotě valenčních elektronů. To potvrzuje účast vázaných elektronů na anihilačním procesu.

## FERMIHO PLOCHA

Ke stanovení Fermiho plochy v kovech bylo vypracováno několik metod, a to *anomální skin efekt, cyklotronová rezonance, de Haas-van Alphenův jev, magneto-rezistence a magnetoakustický jev* [23, 24]. Tyto metody vyžadují poměrně složitou experimentální techniku (hluboké teploty, silná magnetická pole, velmi čisté materiály). Metoda pozitronové anihilace je experimentálně podstatně jednodušší a přitom dává výsledky, které odpovídají výsledkům uvedených metod. Osvědčuje se např. u kovů vzácných zemin, u nichž je velmi obtížné zajistit čistotu požadovanou ostatními metodami, nebo u slitin, kde jsou ostatní metody nepoužitelné pro krátkou střední volnou dráhu elektronů.



Obr. 6. Anihilační spektrum monokrystalu mědi v orientaci a) [111], b) [110] podle FUJIWARA a SUEOKY [26]. Nad křivkami jsou zakresleny odpovídající průměty Fermiho plochy.

Prvá měření rozdělení hybností elektronů v závislosti na orientaci krystalu provedli na grafitu BERKO aj. [25]. Pozoruhodných výsledků dosáhli FUJIWARA a SUEOKA [26] u mědi. Aktivovali monokrystal v reaktoru, takže radioizotop Cu 64 byl přímo součástí vzorku. Tím dosáhli vysoké aktivity (1 – 2 curie) vzorku, která umožnila zvýšit rozlišovací schopnost přístroje. Doplnili také měřicí zařízení druhým párem šterbin umístěným kolmo na první pár. Tím mohli sledovat detaily anihilační křivky. Na obr. 6 jsou jejich výsledky uvedeny: U křivky a) byl směr anihilačních fotonů rovnoběžný se směrem [111] a snímala se složka hybnosti připadající do směru [110], u křivky b) se měřila složka ve směru [111]. Čárkovaně jsou vyznačeny úseky spektra ovlivněné výstupky na Fermiho ploše ve směrech  $\langle 111 \rangle$ , v nichž se Fermiho plocha dotýká Brillouinovy zóny. V těchto úsecích autoři provedli korekci na konečnou



rozlišovací schopnost přístroje a určili poloměr kruhové oblasti, v níž dochází k dotyku s hranicí zóny. Výsledek  $2,7 \cdot 10^{-20} \text{ g cm s}^{-1}$  dobře souhlasí s výsledky jiných metod.

Nedávno stanovili tvar Fermiho plochy u několika kovů vzácných zemin pomocí anihilačních spekter WILLIAMS aj. [27]. Tím prokázali užitečnost této metody u látek, u nichž ostatní metody selhaly.

### EFEKTIVNÍ HMOTA POZITRONU

Termalizovaný pozitron se chová jako kvazičástice a lze mu formálně přiřadit efektivní hmotu  $m_+^*$ . Její velikost závisí na interakci pozitronu s elektronem, s potenciálem mřížky (určuje tzv. *zonální efektivní hmotu*) a s fonony. STEWART aj. [28] stanovili experimentálně efektivní hmotu pozitronu v sodíku pomocí teplotní závislosti funkce  $N(\Theta)$  v oblasti úhlů  $\Theta$  blízkých  $\Theta_F$ . Rozdělovací funkce  $N(\Theta)$  má totiž v okolí Fermiho hybnosti ostrý zlom, který se s rostoucí teplotou vyhlazuje. Při malé koncentraci pozitronů (asi  $10^{12}$ krát menší, než je hustota elektronů v kovech) lze zanedbat vzájemnou interakci a předpokládat, že hybnost pozitronů je popsána Maxwellovým rozdělením

$$(5) \quad g_+(\mathbf{p}) = (2m_+^*kT)^{-3/2} \exp(-p^2/2m_+^*kT);$$

$k$  je Boltzmannova konstanta a  $T$  absolutní teplota. Hybnost elektronů v kovu je dána Fermiho-Diracovým rozdělením

$$(6) \quad f_-(\mathbf{p}) = \{\exp[E(\mathbf{p}) - E_F/kT] + 1\}^{-1},$$

kteří závisí rovněž na teplotě. Přitom  $E(\mathbf{p})$  je energie elektronu a  $E_F$  Fermiho energie. Spektrum anihilujících částic bude potom dáno výrazem

$$(7) \quad F(\mathbf{p}) = \iint f_-(\mathbf{p}_-) g_+(\mathbf{p}_+) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_- - \mathbf{p}_+) d^3\mathbf{p}_- d^3\mathbf{p}_+;$$

$\mathbf{p}_-$  je hybnost elektronů,  $\mathbf{p}_+$  hybnost pozitronů. Odtud plyne pro úhlové rozdělení vztah

$$(8) \quad N(\Theta) = C \int f_-(\mathbf{p}) g_+(\mathbf{p} - \mathbf{p}_+) d^3\mathbf{p} dp_x dp_y;$$

$C$  je konstanta úměrnosti. Experimentálně se určí teplotní závislost této funkce pro  $\Theta = \Theta_F$ . Předpokládáme-li, že Fermiho plocha má tvar koule, lze z rovnice (8) odvodit vztah [29]

$$(9) \quad \frac{N(\Theta_F)}{N(0)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{m_+^* T}{m_-^* T_F} \right)^{1/2} - \frac{1}{4} \frac{m_+^* T}{m_-^* T_F} + \varphi \left( \frac{T}{T_F} \right);$$

$T_F$  je Fermiho teplota elektronového plynu,  $m_e^*$  efektivní hmota elektronu a funkce  $\varphi(T/T_F)$  zahrnuje členy  $T/T_F$  vyšších řádů. V rovnici (9) se uplatňuje především první člen, protože v kovech je  $T \ll T_F$ . STEWART aj. [28] naměřili u sodíku  $m_e^* = (1,9 \pm \pm 0,4) m_0$ , přitom výpočty zonální efektivní hmoty vedly k hodnotě  $1,06m_0$  [29] a z elektron-positronové interakce získal HAMANN [30] výsledek  $1,18m_0$ .

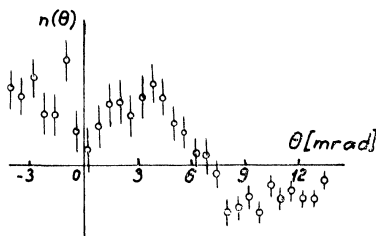
## ANIHILACE POLARIZOVANÝCH POZITRONŮ VE FEROMAGNETIKÁCH

Pozitrony uvolňované při  $\beta^+$  rozpadu mají směr spinu převážně rovnoběžný se směrem hybnosti. Tato polarizace se při termalizaci pozitronů zachovává, což umožňuje studovat polarizaci elektronů v různých slupkách feromagnetických látek. Dvoukvantová anihilace pozitronu s elektronem je totiž možná jen při antiparalelních spinech obou částic.

K orientaci spinů ve feromagnetiku se používá silného magnetického pole (asi 6,5 kG), aby se dosáhlo nasycené magnetizace. Prvá měření tohoto druhu provedli HANNA a PRESTON [31]. Studovali rozdíl mezi anihilačními křivkami v železe a niklu pro paralelní i antiparalelní směry magnetického pole ke směru polarizace pozitronů, tj. ke směru vstupu pozitronů do vzorku. Měřili veličinu

$$(10) \quad n(\theta) = N_{\uparrow}(\theta) - N_{\downarrow}(\theta);$$

$N_{\uparrow}(\theta)$  značí úhlové rozdělení odpovídající paralelnímu a  $N_{\downarrow}(\theta)$  antiparalelnímu uspořádání. Protože anihilační fotony, které se projevují odchylkou  $\theta > \theta_F$ , vznikají převážně při anihilaci s vázanými elektrony, lze ze znaménka veličiny  $n(\theta)$  soudit na směr magnetizace elektronů k celkové magnetizaci vzorku. Z výsledku plyne, že směr celkové magnetizace 3d-elektronů je v uvedených kovech totožný se směrem magnetizace vzorku.



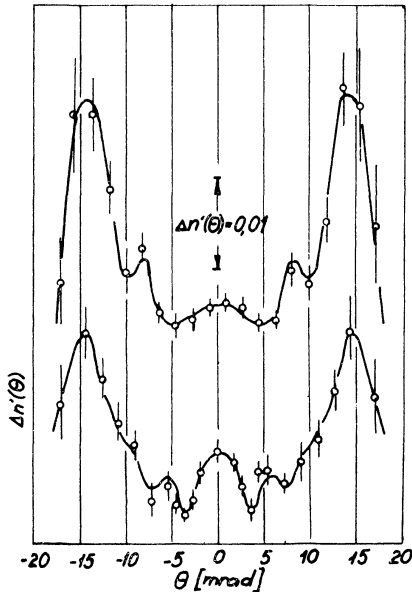
Obr. 7. Závislost  $n(\theta)$  na úhlu  $\theta$  pro krystal železa ve směru [110] podle MIJNARENSE a HAMBRO [32].

Těchto měření se pokusili někteří autoři [32, 33] využít i ke stanovení polarizace volných elektronů v železe a niklu. Výsledky MIJNARENSOVY a HAMBROVY [32] zachycené na obr. 7 ukazují, že veličina  $n(\theta)$  mění znaménko při úhlu  $\theta = \theta_F$ . Z toho však nelze usuzovat, že 4s elektrony mají opačnou polarizaci než 3d elektrony.

K měření bylo použito krystalu tak, aby se snímala složka připadající do směru [110]. Protože podíl tříkvantové anihilace, která se uplatňuje pouze při paralelních spinech anihilujících částic, je zanedbatelný (nepřekračuje 0,1% všech anihilací), lze psát vztah

$$(11) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} N_{\uparrow}(\theta) d\theta = \int_{-\infty}^{+\infty} N_{\downarrow}(\theta) d\theta .$$

Oba výrazy udávají celkový počet pozitronů vstupujících do vzorku a ten nezávisí na orientaci magnetického pole. Proto při platnosti podmínky (6) musí výraz (10) měnit znaménko a nelze z něho usuzovat na polarizaci 4s elektronů.



Obr. 8. Polarizační struktura elektronů v monokrystalu niklu podle MIHALISINA a PARKSE [34]. Horní křivka odpovídá orientaci [100], dolní [111]. Počátek pořadnic je volen libovolně (proto označení  $\Delta n'(\theta)$ ).

Aby bylo možno stanovit i polarizaci 4s elektronů, je třeba získat funkci  $n(\theta)$  pro různé orientace krystalu. Protože Fermiho plochy jsou u polarizovaných 4s elektronů rozdílné, lze takový rozbor provést. Rozdíl ve Fermiho hybnostech pro spiny paralelní a antiparalelní s magnetickým polem se projevuje na křivce  $n(\theta)$  převládajícím směrem polarizace. Na obr. 8 jsou zobrazeny křivky popsané veličinou  $n'(\theta)$  definovanou vztahem

$$(12) \quad n'(\theta) = \frac{N_{\uparrow}(\theta) - N_{\downarrow}(\theta)}{N_{\uparrow}(\theta) + N_{\downarrow}(\theta)} .$$

Přitom jde u niklu o orientace [100] a [111]. Při výkladu křivek vznikají potíže, protože Fermiho plocha niklu je dosud velmi málo známa a rovněž nelze uvést konečný tvar vlnových funkcí elektronů i se spinovou složkou. MIHALISIN a PARKS [34] podali na základě pásové struktury niklu pouze kvalitativní výklad. Teorie dosud vypracována nebyla.

## ANIHILACE POZITRONŮ V KAPALNÝCH KOVECH

U kapalných kovů nelze ke studiu elektronové struktury použít metod založených na dlouhé střední volné dráze elektronů. Uplatnila se metoda pozitronové anihilace, neboť tomuto omezení nepodléhá. Zejména se osvědčila při studiu „rozmazání“ Fermiho plochy při teplotě tání a redistribuci volných a vázaných elektronů v kovech.

Vliv tání na anihilační spektrum rtuti vyšetřovali GUSTAFSON aj. [35]. Aproximovali působení vázaných elektronů na spektrum Gaussovou křivkou, jejíž plochu v tuhé i kapalně fázi normovali na stejnou hodnotu. Zjistili, že počet vodivostních elektronů vzrostl z 25% v tuhé fázi na 40% ve fázi kapalně. Dále pozorovali odchylky od parabolického tvaru spektra. Interpretovali je jako projev rozptylu elektronů na rozrušené mřížce a důsledek rozšíření energetických hladin.

Měření v galii [36] ukazují ještě výraznější „rozmazání“ Fermiho plochy než u rtuti.

KUSMISS a STEWART [37] provedli měření anihilačních spekter 14 kovů při pokojové teplotě a při teplotách těsně pod bodem tání a nad bodem tání. Pozorovali vyhlazení zlomu spektra v okolí Fermiho hybnosti a změnu parabolické i gaussovské složky. Na základě těchto výsledků rozdělili kovy na 3 skupiny:

1. *anihilační křivky se při bodu tání mění*, např. u Bi, Ga, Hg, Sn, Te, Sb,
2. *změna tvaru nastává již hluboko pod bodem tání*, např. u Al, Cd, In, Pb, Zn a
3. *změna spektra se neprojevuje*, např. u Na, Li, Se, Tl.

Většina těchto jevů není dosud objasněna. Rovněž uvedené třídění vyžaduje podrobnější znalost mechanismu pozitronové anihilace. Příčina těchto jevů nebude pravděpodobně pouze ve změně volné dráhy elektronů (při vyšších teplotách nebo v kapalně fázi), nýbrž i v rozptylu pozitronů na iontech kovu.

SEDOV [38] ukazuje na možnost vzniku páru *elektron-díra* při anihilaci pozitronů v kovech (elektron je excitován do stavů nad Fermiho energií, a tím uvolní stav uvnitř Fermiho koule). Dá se předpokládat, že tento mechanismus přispívá k uvedeným změnám v anihilačním spektru, třebaže u různých kovů se uplatňuje různou měrou.

V poslední době měřili anihilační spektra vizmutu, rtuti a jejich slitin v tuhé i kapalně fázi WEST aj. [39]. Provedli i výpočty příspěvků jednotlivých složek pomocí jednočásticové teorie a zjistili nesouhlas pro vázané elektrony, zatímco u vodivostních elektronů v kapalně vizmutu byl souhlas poměrně dobrý.

## ELEKTRONOVÁ STRUKTURA SLITIN

Metoda pozitronové anihilace je užitečná zvláště u slitin, protože umožňuje stanovit Fermiho plochy, zatímco ostatních metod nelze pro tato měření použít.

DĚCHŤAR aj. [40] se poprvé zabývali studiem slitin pomocí pozitronové anihilace. Zjišťovali, jaké změny v elektronové struktuře binárních slitin  $\text{Ni}_3\text{Mn}$ ,  $\text{Cu}_3\text{Au}$  a  $\text{CuAu}$  vyvolává proces uspořádání; hledali příčinu stabilizace uspořádané fáze. Pozorovali,

že v uspořádané slitině Ni<sub>3</sub>Mn klesla Fermiho hybnost z hodnoty  $8,52 \times 10^{-3} m_0 c$  o 6%, ve slitině CuAu z hodnoty  $8,9 \times 10^{-3} m_0 c$  dokonce o 11%, zatímco ve slitině Cu<sub>3</sub>Au se neprojevila žádná změna. Odtud autoři vyvodili závěr, že ke stabilizaci uspořádané fáze přispívá snížení střední kinetické energie vodivostních elektronů, zatímco u slitiny Cu<sub>3</sub>Au ji podporuje snížení deformační energie mřížky.

STEWART [41] měřil anihilační spektra ve slitinách Li-Mg při koncentracích 0, 19 a 59% Mg (hořčík se rozpouští v lithiu až do koncentrace 70%, aniž podstatně mění mřížkový parametr). Při koncentraci 59% Mg se Fermiho plocha již dotýká Brillouinovy zóny. Stewartovy výsledky ukazují, že elektrony lze v těchto slitinách považovat za téměř volné a jejich efektivní koncentrace je určena jedním vodivostním elektronem lithia a dvěma elektrony hořčíku.

První přímé informace o tvaru Fermiho plochy slitin získali FUJIWARA aj. [42] u slitiny Cu – 10,6 at. % Al metodou popsanou nahoře. Ve směrech  $\langle 111 \rangle$  zjistili výběžky podobné, jaké se vyskytují u Fermiho plochy mědi (obr. 6). Protože hliník zvyšuje počet valenčních elektronů ve slitině (způsobuje rozšíření Fermiho plochy), pozorovali autoři růst poloměru oblastí, v nichž se Fermiho plocha dotýká Brillouinovy zóny (poloměr vzrostl z 1 mrad u čisté mědi na 2,2 mrad u slitiny).

#### POZITRONOVÁ ANIHILACE A PLASTICKÁ DEFORMACE KOVŮ

Studium změn anihilačních spekter v deformovaných kovech a slitinách umožňuje získat informace o vlivu dislokací na elektronovou strukturu deformovaných látek, jak vyplývá z četných prací Děchťarových. DĚCHŤAR aj. [43] totiž prokázali jako první, že plastická deformace má značný vliv na anihilační spektra niklu a slitin Ni-Fe. (Plastické deformace dosahovali válcováním za studena s redukcí 70 až 80%.) Změnu tvaru spektra popsali relativní změnou maxima  $\Delta N/N_0$  a pološířky  $\Delta b/b_0$  (neindexové veličiny se vztahují na deformovaný, indexové „0“ na vyžíhaný stav). V tab. 1

Tabulka I.: Změny charakteristických veličin anihilačních spekter některých kovů a slitin po plastické deformaci.

Látka	Ni	Ni + 62%Fe	Ni + 64%Fe	Fe	Fe + 0,63% Al	Fe + 1,08% Al
$\Delta N/N_0$ [%]	13,5	10,7	7,0	6,5	11,8	14,4
$\Delta b/b_0$ [%]	14,5	10,0	10,3	5,0	8,7	14,0

jsou uvedeny výsledky [43, 44]. Je patrné, že pole napětí vyvolané dislokacemi způsobuje zúžení křivky, tj. růst maxima, a zmenšení pološířky. Aby autoři prokázali, že pozorované jevy souvisí se vznikem dislokací, provedli izochronální žíhání deforma-

vaných vzorků. Zjistili, že změny ve spektru vymizely až po dosažení rekrystalizační teploty, při níž zanikly dislokace, které byly vytvořeny plastickou deformací.

V anihilačním spektru se sčítají příspěvky anihilace pozitronů s elektrony různých slupek. Změny tvaru lze potom popsat kvalitativně redistribucí *s*- a *d*-elektronů v poli napětí dislokace; např. v čistém niklu vzrostl podíl *s*-elektronů vyjádřený v procentech *d*-elektronů z 15% ve vyžíhaném stavu na 30% v deformovaném stavu. Lze tedy předpokládat, že pole napětí vyvolané dislokacemi vede k polarizaci *s*- a *d*-pásů v krystalech přechodných kovů; vzniká *elektrický dipól*. V oblasti rozšíření se vytváří přebytečný náboj a v oblasti stlačení dochází ke zmenšení náboje. Je-li  $n_{0,i}$  počet elektronů *i*-tého pásu v objemové jednotce a  $n_i$  táž veličina za přítomnosti dislokací, lze míru polarizace vyjádřit v prvním přiblížení veličinou [44]

$$(13) \quad D_i = \frac{n_{0,i} - n_i}{n_{0,i}}.$$

Předpokládáme-li, že počet anihilací ve vyžíhaném vzorku  $N_{0,i}(\Theta)$  je úměrný hustotě  $n_{0,i}$  elektronů příslušné skupiny a že podobný vztah platí i pro deformovaný stav, lze psát vztah (13) také ve tvaru

$$(14) \quad D_i = \frac{N_{0,i}(\Theta) - N_i(\Theta)}{N_i(\Theta)}.$$

Část pozitronů se tedy váže na oblasti se zvýšenou hustotou záporného náboje dříve, než dojde k jejich anihilaci. Tím se vysvětlí změny anihilačního spektra, které byly vyvolány dislokacemi.

Nedávno provedli měření na čistém hliníku BERKO a ERSKINE [45] a rovněž pozorovali změny ve tvaru spektra při plastické deformaci vzorku. Opakovali měření s pozitrony z izotopu Ge 68 s energií 1,88 MeV. Tyto pozitrony pronikají hlouběji do vzorku než pozitrony z Na 22 s energií 0,54 MeV. Autoři dostali v obou případech stejný výsledek. Z toho usoudili, že nezáleží na zdroji pozitronů, takže nejde o povrchový jev.

Plastická deformace vyvolává také změnu střední doby života pozitronů. Vyplynulo to z měření MC KEEOVÝCH aj. [46] u hliníku, která dala zvýšení doby života o 20 až 30%.

K polarizačním jevům vedou i další poruchy krystalové mřížky, např. vrstevné chyby, nečistoty atd. Pozitronová anihilace může tyto změny sledovat a tak mít významnou úlohu při objasňování elektronové struktury látek obsahujících mřížkové poruchy [10]. A to jsou všechny reálné látky.

## ANIHILACE POZITRONŮ V SUPRAVODIČÍCH

Supravodivý stav byl také sledován pomocí pozitronové anihilace [13, 47]. Byla studována především střední doba života pozitronů za předpokladu, že elektrony bu-

dou jen slabě reagovat s pozitrony. Pokusy však nebyly úspěšné. Prodloužení střední doby života v olovu z hodnoty  $(1,50 \pm 0,06) \cdot 10^{-10}$  s za pokojové teploty na hodnotu  $(35 \pm 5) \cdot 10^{-10}$  s v supravodivém stavu pozoroval pouze MILLET [47], zatímco jiní autoři [48, 49] nezjistili žádnou změnu. To lze vysvětlit tím, že se na supravodivém stavu podílí jen malý počet elektronů. Úspěšné nebyly ani pokusy zjistit změnu Fermiho plochy [50], způsobenou supravodivým stavem látky, protože je tak malá (relativní změna Fermiho energie v supravodivém stavu se odhaduje na  $10^{-4}$ ), že ji nedovedeme dnešním experimentálním zařízením zachytit.

## ZÁVĚR

Z uvedených informací o pozitronové anihilaci a jejím použití při studiu kovů a slitin vysvítá, že tato metoda účinně zasáhla do různých oblastí fyziky kovů; zvláště úspěšná je při studiu Fermiho plochy slitin. Umožňuje řešit vliv dislokací i ostatních mřížkových poruch na elektronovou strukturu kovových látek, a tím ukazuje, že podíl elektronové složky nelze zanedbávat ani u takových vlastností látek, jako jsou mechanické vlastnosti. Rovněž změny v elektronové struktuře vyvolané teplotou, fázovými přechody, uspořádacími pochody aj. lze touto metodou zachytit. Významná je i úloha pozitronové anihilace při studiu orientace různých skupin elektronů ve feromagnetických látkách, neboť polarizované pozitrony podávají o této orientaci užitečné informace.

## Literatura

Z rozsáhlého seznamu literatury uvádíme jen několik citací; celý seznam může redakce zájemcům poslat na požádání.

- [11] BERKO S., HEREFORD F. L.: *Rev. Mod. Phys.* 28 (1956), 299.
- [12] WALLACE P. R.: *Solid State Physics* 10 (1960), 1.
- [13] STEWART A. T.: Sborník *Positron Anihilation* (Ed. A. T. Stewart, L. O. Roellig). Academic Press, New York 1965, 17.
- [14] FRAIT Z., FRAITOVÁ D.: *Čs. čas. fys.* A 18 (1968), 315.
- [15] ČÍŽEK A.: *Kovové materiály* 4 (1967), 301.