

PACS numbers: 61.46.Df, 71.60.+z, 73.22.Dj, 77.22.Ej, 78.67.Rb, 78.70.Bj, 79.20.Mb

Теория позитрониевых состояний в нанопорах кристаллических триглицеридов

С. И. Покутний, А. П. Шпак, В. Н. Уваров, М. С. Покутний

*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,
бульв. Акад. Вернадского, 36,
03680, ГСП, Киев-142, Украина*

Теоретически исследуется зависимость энергии связи электронно-позитронной пары от радиуса нанопор, содержащихся в кристаллических триглицеридах. Установлен пороговый характер возникновения основного состояния объёмного парапозитрония в нанопоре и определено значение критического радиуса нанопоры, начиная с которого в нанопоре может образоваться объёмный парапозитроний.

Теоретично досліджується залежність енергії зв'язку електронно-позитронної пари від радіуса нанопор, що містяться в кристалічних триглицеридах. Встановлено пороговий характер виникнення основного стану об'ємного парапозитронію в нанопорі та визначено значення критичного радіуса нанопори, починаючи з якого в нанопорі може утворитися об'ємний парапозитроній.

Theoretical investigations of the binding energy of electron–positron pair in nanovoids within the crystalline triglycerides depending on nanovoid radius are carried out. The threshold character of the appearance of bulk-parapositronium ground state in nanovoid is revealed, and critical radius of the nanovoid, above which a bulk parapositronium can be formed in the nanovoid, is determined.

Ключевые слова: позитрониевое состояние, энергия связи, нанопоры, объёмный парапозитроний, кулоновское и поляризационное взаимодействие.

(Получено 3 марта 2011 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

В [1–3] было установлено, что вид спектра люминесценции аморф-

ных и кристаллических триглицеридов жирных кислот зависел от радиуса a нанопор (НП), содержащихся в таких триглицеридах. При этом радиусы НП находились в интервале $0,3 \text{ нм} \leq a \leq 0,6 \text{ нм}$. Область спектра люминесценции таких наносистем варьировалась от видимой до ближней ультрафиолетовой. Последнее обстоятельство может быть использовано при производстве дисплеев [4]. Методом электронно-позитронной аннигиляции в [1] было установлено, что в НП, содержащихся в твердой фазе триглицеридов жирных кислот, радиусы которых находились в интервале $0,3 \text{ нм} \leq a \leq 0,5 \text{ нм}$, возникал водородоподобный атом позитрония с энергией связи $E_{ps} = -6,77 \text{ эВ}$.

В настоящее время отсутствуют теоретические исследования, в которых изучалось бы возникновение позитрония и его структура в НП триглицеридов жирных кислот. Поэтому теоретические исследования, направленные на решение такой проблемы, являются весьма актуальными.

В данной работе приведены результаты вариационного расчета энергии связи основного состояния электронно-позитронной пары $E(a)$, как функции радиуса a НП, содержащихся в кристаллических и аморфных триглицеридах жирных кислот. Установлено, что возникновение основного состояния объемного парапозитрония носит пороговый характер и возможно лишь в НП, радиус которой a превышает значение некоторого критического радиуса $a_c \approx 4,4 \text{ нм}$.

2. ГАМИЛЬТониАН ЭЛЕКТРОННО-ПОЗИТРОННОЙ ПАРЫ В НАНОПОРЕ

Рассмотрим простую модель квазинульмерной системы: нейтральную сферическую НП радиуса a с диэлектрической проницаемостью (ДП) $\epsilon_2 = 1$, окруженную средой с ДП ϵ_1 (причем относительная ДП $\epsilon = (\epsilon_2/\epsilon_1) < 1$). В объеме НП двигались электрон e и позитрон p с эффективными массами m_e и m_p соответственно. Поскольку $m_e = m_p = m_0$ (где m_0 — масса свободного электрона), то электрону и позитрону энергетически выгодно, двигаясь в объеме НП, находиться на одной прямой, проходящей через центр НП, и на одном и том же расстоянии $r_e = r_p = \rho/2$ от центра НП (см. рис. 1).

Запишем гамильтониан электронно-позитронной пары (ее синглетного состояния, в котором спины $1s$ -электрона и $1s$ -позитрона антипараллельны), движущейся в объеме НП радиуса a , в системе центра масс и в приближении эффективной массы:

$$H(\xi, S) = -\frac{E_0}{4S^2} \frac{1}{\xi} \frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{d}{d\xi} \right) + V_{ep}(\xi, S) + V_{ep'}(\xi, S) + V_{pe'}(\xi, S), \quad (1)$$

где первый член является оператором кинетической энергии элек-

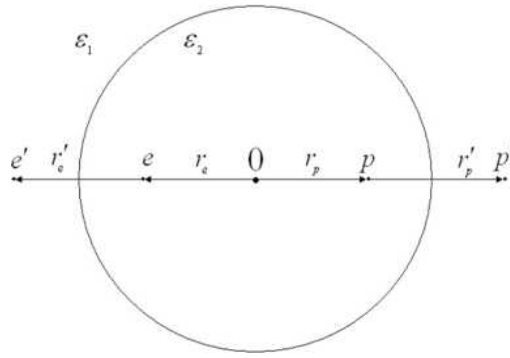


Рис. 1. Схематическое изображение позитрония в сферической нанопоре. Радиус-векторы r_e и r_p – расстояния электрона e и позитрона p от центра (точки O) НП с радиусом a . Заряды изображений $e' = -(a/r_e)e$ и $p' = -(a/r_p)p$ расположены на расстояниях $r'_e = a^2/r_e$ и $r'_p = a^2/r_p$ от центра НП и представляют собой точечные заряды изображения электрона и позитрона соответственно [5–7].

тронно-позитронной пары; энергия кулоновского взаимодействия электрона с позитроном $V_{ep}(\xi, S)$ описывается формулой

$$V_{ep}(\xi, S) = -\frac{E_0}{S} \frac{1}{\xi} \quad (2)$$

(где $\xi = \rho/(2a)$). Поскольку относительная ДП наносистемы $\epsilon = \epsilon_2/\epsilon_1 < 1$, то энергии взаимодействия электрона $V_{ep}(\xi, S)$ и позитрона $V_{pe}(\xi, S)$ с «чужими» изображениями, возникающими на сферической поверхности раздела (НП–среда), принимают вид [5, 6] (см. рис. 1):

$$V_{ep'}(\xi, S) = V_{ep'}(\xi, S) = \frac{a}{1 + \xi^2} \frac{E_0}{S}, \quad (3)$$

где параметр наносистемы

$$\alpha = \frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2}. \quad (4)$$

В гамильтониане (1) НП описывается с помощью модели бесконечно глубокой потенциальной ямы. Здесь и далее энергия измеряется в единицах

$$E_0 = \frac{m_0 e^4}{4\hbar} \quad (5)$$

(где $E_0 = 6,803$ эВ является энергией связи позитрония в вакууме) и

вводится безразмерный радиус НП $S = a/a_{ep}$ (где $a_{ep} = 2\hbar/(m_0e^2) = 1,06 \cdot 10^{-1}$ нм — боровский радиус позитрония в вакууме).

3. ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ ЭЛЕКТРОННО-ПОЗИТРОННОЙ ПАРЫ В НАНОПОРЕ

Определим энергию связи основного состояния электронно-позитронной пары (ее синглетного состояния, в котором спины $1s$ -электрона и $1s$ -позитрона антипараллельны) в НП радиуса S вариационным методом. Для этого найдем решение радиального уравнения Шредингера с гамильтонианом $H(\xi, S)$ (1) вариационным методом. Вариационную радиальную волновую функцию основного состояния электронно-позитронной пары в НП радиуса s зададим в таком виде:

$$\Psi(\xi, S) = L(1 - \xi)\exp(-v(S)/2\xi), \quad (6)$$

где $v(S) = 2\beta(S)S$, а $\beta(s)$ является вариационным параметром. Величина $L(\beta(S), S)$, которая определяется из условия нормировки волновой функции (6), принимает значение

$$L(\beta(S), S) = \left(\beta(S) / 2a_{ep}\right)^{-3/2} \times \left[1 - \frac{6}{v(S)} + \frac{12}{v^2(S)} - \left(1 + \frac{6}{v(S)} + \frac{12}{v^2(S)} \exp(-v(S))\right)\right]^{-1/2}. \quad (7)$$

Вариационная волновая функция $\Psi(\xi, S)$, выбранная в виде (6), содержит в себе кулоновскую волновую функцию. Кроме того, она равняется нулю при $\xi = 1$, что соответствует существованию на сферической поверхности раздела (НП–среда) при $\xi = 1$ бесконечно высокого потенциального барьера.

Для определения вариационным методом энергии связи основного состояния электронно-позитронной пары $E(a)$ в НП радиуса a среднее значение гамильтониана $H(\xi, a)$ (1) на волновых функциях $\Psi(\xi, a)$ (6) запишем в таком виде:

$$E(a, \beta(a)) = \langle \Psi(\xi, a) | H(\xi, a) | \Psi(\xi, a) \rangle \quad (8)$$

Расчет зависимости энергии связи $E(a)$ основного состояния электронно-позитронной пары от радиуса НП a получим путем минимизации функционала(8):

$$\frac{\partial E(a, \beta(a))}{\partial \beta(a)} \equiv F(a, \beta(a)) = 0. \quad (9)$$

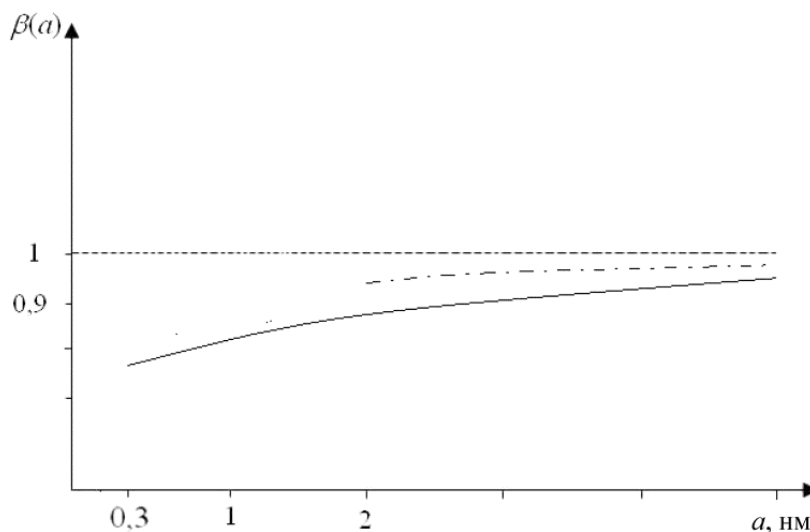


Рис. 2. Зависимость вариационного параметра $\beta(a)$ от радиуса a нанопоры: $\beta = 1$ (пунктир), $\beta(a)$ (14) (сплошная линия), $\beta(a)$ (10) (штрих-пунктир).

Не выписывая громоздких выражений для функционала (9), приведем здесь численное решение уравнения (9) в виде графика зависимости $\beta(a)$ (см. рис. 2). Из рисунка 2 следует, что решением этого уравнения является функция $\beta(a)$, которая монотонно слабо меняется в пределах

$$0,95 \leq \beta(a) \leq 0,99 \quad (10)$$

при изменении радиуса a НП в интервале

$$2 \text{ нм} \leq a \leq 5 \text{ нм}. \quad (11)$$

Подставляя значения вариационного параметра $\beta(a)$ (10), взятого из графика зависимости $\beta(a)$ (см. рис. 2), одновременно с соответствующими значениями радиуса a НП из интервала (11) в функционале (8), получим энергию связи основного состояния электронно-позитронной пары $E(a)$, как функцию a НП (см. рис. 3).

Следует отметить, что гамильтониан $H(\xi, a)$ 1) электронно-позитронной пары, движущейся в НП с радиусами a (11), содержит энергии взаимодействия электрона $V_{ep}(\xi, a)$ (3) и позитрона $V_{ep}(\xi, a)$ с «чужими» изображениями. Это связано с тем обстоятельством, что возможность использования энергии взаимодействия $V_{ep}(\xi, a)$, $V_{pe}(\xi, a)$, которые получены в [5–7] в рамках макроскопической электростатики, может быть оправдана, если изучаемые НП имеют макроскопические размеры a (11) [5–9].

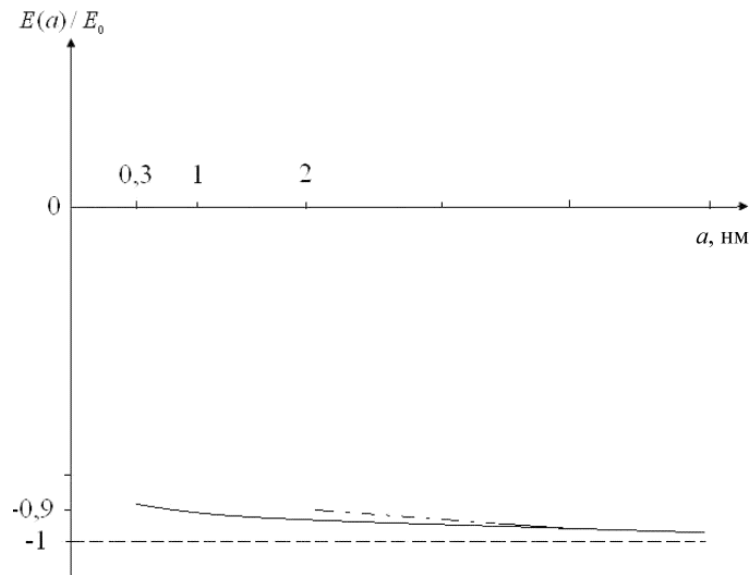


Рис. 3. Зависимость энергии связи $E(a)$ электронно-позитронной пары от радиуса a нанопоры. Значение энергии связи позитрония в вакууме $E_0 = 6,803$ эВ изображено пунктиром. Значения $E(a)$ (8) полученные вариационным методом: с учетом в потенциальной энергии гамильтониана (1) только энергии кулоновского взаимодействия электрона с позитроном (2) (сплошная линия); с учетом в потенциальной энергии гамильтониана (1) энергии кулоновского взаимодействия электрона с позитроном (2), а также энергий взаимодействия электрона и позитрона с «чужими» изображениями (3) (штрих-пунктир).

Для нахождения энергии связи основного состояния электронно-позитронной пары $E(a)$ (8) в НП с радиусами a , которые изменяются в интервале

$$0,3 \text{ нм} \leq a \leq 2 \text{ нм}, \quad (12)$$

необходимо в гамильтониане $H(\xi, a)$ (1) учитывать только энергию кулоновского взаимодействия электрона с позитроном $V_{ep}(\xi, a)$ (2). При этом численное решение уравнения (9) для интервала радиусов НП

$$0,3 \text{ нм} \leq a \leq 5 \text{ нм} \quad (13)$$

можно представить функцией $\beta(a)$, которая монотонно изменяется (см. рис. 2) в пределах

$$0,78 \leq \beta(a) \leq 0,96. \quad (14)$$

Значения функции $\beta(a)$ (10) в интервале радиусов НП a (11) слабо (в пределе, не превышающем 4%) отличаются от значений функции $\beta(a)$ (14), полученных для интервала радиусов НП a (13) (см. рис. 2).

Вариационный расчет энергии связи основного состояния электронно-позитронной пары $E(a)$ (8) в НП с радиусами a (11), выполненный с учетом в потенциальной энергии гамильтониана $H(\xi, a)$ (1) энергии кулоновского взаимодействия электрона с позитроном $V_{ep}(\xi, a)$ (2), а также энергий взаимодействия электрона $V_{ep}(\xi, a)$ и позитрона $V_{pe}(\xi, a)$ (3) с «чужими» изображениями, давал значения $E(a)$, которые слабо (в пределе, не превышающем 5%) отличались от зависимости $E(a)$ (8) в НП с радиусами a (13), полученной с учетом в потенциальной энергии гамильтониана $H(\xi, a)$ (1) лишь энергии кулоновского взаимодействия электрона с позитроном $V_{ep}(\xi, a)$ (2) (см. рис. 3). При этом основной вклад в энергию связи основного состояния электронно-позитронной пары $E(a)$ (8) в НП с радиусами a (11) вносила энергия кулоновского взаимодействия электрона с позитроном $V_{ep}(\xi, a)$, а энергии взаимодействия электрона $V_{ep}(\xi, a)$ (2) и позитрона $V_{pe}(\xi, a)$ (3), с «чужими» изображениями давали лишь малый вклад (не превышающий 5%) (см. рис. 3).

4. СРАВНЕНИЕ ТЕОРИИ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

Значения функции $\beta(a)$ (10), (14) и энергии связи электронно-позитронной пары $E(a)$ (8) в НП, радиусы которых определялись условиями (11), (13) были здесь получены в условиях эксперимента [1] (параметр наносистемы α (4) равнялся 0,6).

В [1] было установлено, что в НП, содержащихся в твердой фазе триглицеридов жирных кислот, радиусы которых изменялись в интервале $0,3 \text{ нм} \leq a \leq 0,5 \text{ нм}$, возникал водородоподобный атом позитрония с энергией связи $E_{ps} = -6,77 \text{ эВ}$.

В [1] также было показано, что в триглицеридах термодинамически наиболее стабильные НП имели средний радиус $\bar{a} = 0,355 \text{ нм}$. Вариационный расчет энергии связи основного состояния электронно-позитронной пары в НП радиусом $\bar{a} = 0,355 \text{ нм}$ дает значение $E_1 = -6,0 \text{ эВ}$ (см. рис. 3), которое незначительно (в пределах $\Delta = (E_{ps} - E_1) / E_{ps} \approx 11,4\%$) отличается от энергии связи $E_{ps} = -6,77 \text{ эВ}$, полученной в [1]. Значение E_1 получено здесь в предположении, в котором в потенциальной энергии гамильтониана $H(\xi, a)$ содержалась только энергия кулоновского взаимодействия электрона с позитроном $V_{ep}(\xi, a)$. Такое отличие, по-видимому, обусловлено тем, что вариационный расчет может давать заниженные значения энергии связи $|E(a)|$ позитрония [10].

Следует отметить, что полученные нами выражения $\beta(a)$ (10), (14) и $E(a)$ (8) в НП радиусами a (11), (13), позволили проследить предельный переход в НП большого радиуса (например, при $a \approx 4,4$

нм) вариационного параметра $\beta(a)$ к значению $\beta = 1$, а также энергии связи $E(a)$ (8) — к значению энергии связи позитрония $E_0 \approx 6,803$ эВ (5) в вакууме (см. рис. 2 и рис. 3).

Под объемным позитронием в НП подразумевается позитроний, структура которого (приведенная эффективная масса, боровский радиус, энергия связи) в НП не отличается от структуры позитрония в вакууме. Таким образом, объемный парапозитроний возникает в основном состоянии только в НП с радиусом $a \geq a_c \approx 4,4$ нм (см. рис. 3). Причем образование такого объемного парапозитрония носит пороговый характер и, возможно, лишь в НП, радиус a которой превышает значение некоторого критического радиуса a_c НП.

В настоящей работе показано, что полученное вариационным методом выражение $E(a)$ (8) (см. рис. 3), описывающее энергию связи основного состояния электронно-позитронной пары, как функцию радиуса a НП, определяется перенормировкой энергии кулоновского взаимодействия электрона с позитроном $V_{ep}(\xi, S)$ (2), связанной с чисто пространственным ограничением области квантования объемом НП, а также перенормировкой энергий взаимодействия электрона и позитрона с «чужими» изображениями (3), возникающими на сферической поверхности раздела (НП–среда) (см. рис. 1).

Основной вклад в энергию связи $E(a)$ (8) основного состояния электронно-позитронной пары вносит энергия кулоновского взаимодействия электрона с позитроном (2), и только в качестве поправки выступают энергии НП радиусом $\bar{a} = 0,355$ нм, слабо отличалось от экспериментального значения взаимодействия электрона (3) и позитрона (3) с «чужими» изображениями. При этом найдено значение энергии связи парапозитрония $E(a = \bar{a}) = E_1$ в E_{Ps} .

Установлено, что возникновение основного состояния объемного парапозитрония носит пороговый характер и возможно лишь в НП, радиус которой a превышал значение некоторого критического радиуса $a_c \approx 4,4$ нм.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. T. Rashevskaya, I. Guly, and M. Pryadko, *Int. Agrophys.*, **14**: 221 (2000).
2. T. Rashevskaya, I. Gulyi, and A. Ukrainets, *Mater. Sci. Eng. C*, **19**, No. 1/2: 197 (2002).
3. V. I. Kudryavtsev, S. M. Yablochkov, and S. P. Likhtorovich, *J. Functional Materials*, **7**, No. 3: 525 (2002).
4. М. М. Нищенко, С. П. Лихторович, *Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии*, **1**, № 1: 193 (2003).
5. Н. А. Ефремов, С. И. Покутний, *ФТТ*, **32**, № 6: 1637 (1990); idem, *Sov. Phys. Solid State*, **32**, No. 6: 955 (1990).
6. С. И. Покутний, *ФТП*, **25**, № 4: 628 (1991); idem, *Sov. Semiconductors*, **25**, No. 4: 381 (1991).
7. Н. А. Ефремов, С. И. Покутний, *ФТТ*, **27**, № 1: 48 (1985); idem, *Sov. Phys.*

- Solid State*, **27**, No. 1: 27 (1985).
8. V. N. Soloviev, A. Eeichofer, and D. Frenske, *Phys. Status Solidi B*, **224**, No. 1: 285 (2001).
 9. R. T. Collins, P. M. Fauchet, and M. A. Tischer, *Phys. Today*, **50**, No. 1: 24 (1997).
 10. А. Б. Мигдал, *Качественные методы в квантовой теории* (Москва: Наука: 1975); A. B. Migdal, *Qualitative Methods in Quantum Theory* (Reading: Benjamin: 1977).