

Positroi-bizidenboraren kalkulua metaletan

F. Plazaola

UPV/EHU Zientzi Fakultatea. Elektrizitate eta Elektronika Saila

Abstract

This work presents positron lifetime calculations in Al-Li unrelaxed clusters following the atomistic model proposed by Puska and Nieminen. A description of the way the calculations have been performed to calculate positron annihilation rates in different bi- and tridimensional Li clusters in an Al matrix ranging from clusters of 2 Li atoms till 14 Li atoms is also presented.

Positroi-deuseztapena oinarritzat duten teknika berriak egoera solidoko akatsen egitura ikertzeko oso trebeak izan arren, egoera solidoko beste hainbat arlotan ere trebetasuna erakusten dute. Hala ere positroi-deuseztapena ez da egoera solidoko ikerketara mugatzen. Positroien tomografia (PET) biomedikuntzan oso baliosua da. Astrofisikan ere, gure galaxiaren zentruetik datorren deuseztapen-erradiazioa ikertzeko erabiltzen da.

Solidoetako akats-egituraren ikerketan positroi-deuseztapenak hainbat abantaila erakusten du. Ikerketa hori gauzatzeko, positroien bizidenborak materialetan neurtzen duen teknika da erabiliena.

Lan honetan positroien bizidenborak, material perfektuetan eta akatsetan, kalkulatzeko eredu teoriko baten bi era azalduko dira. Eredu honetan problemaren hiru dimentsioko ezaugarriak mantentzen dira. Positroia akats batean harrapatu dagoenean bizidenbora kalkulatzeko akatsaren geometria mantentzea oso komenigarria denez, Puska eta Nieminen [1] zientzilariak garaturiko eredu atomistikoa erabiliko da. Positroiak solido batean jasaten duen hiru dimentsioko potentziala eraikitzeke nukleoan eta elektroien potentzial elektrostatikoa sareko puntu guztietan batuko dira, eta elektroien positroi koerlazio-efektuak deskribatzeko V_{koer} po-

tentziala gehituko da. Beraz, positroiak jasango potentziala ondoko eran idatziko dugu:

$$V_+(\mathbf{r}) = V_C(\mathbf{r}) + V_{\text{koer}}(\mathbf{r}) \quad (1)$$

Beraz, koerlazio-potentzialak positroieiz perturbatu gabeko elektroien dentsitate lokalaren menpekotasuna du. Honek dentsitate lokalaren hurbilketa barne (LDA), koerlazio-energia $n(\mathbf{r})$ elektroien dentsitateko gasaren barneko positroi bakarrari dagokion elektroien positroi koerlazio energiaren emanda datorrela adierazten du. Elektroien dentsitatearekiko V_{koer} potentzialaren menpekotasuna adierazteko, Boronski eta Nieminen [2] parametrizazioa erabili da. Sare kristalinoaren karga-dentsitatea, $n(\mathbf{r})$, eta potentzial elektrostatikoa, $V_C(\mathbf{r})$ karga-dentsitate atomikoen gainezarmena erabiliz hurbildu da, hots:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i n_{\text{at}}(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|), \quad V_C(\mathbf{r}) = \sum_i V_{\text{at}}(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|) \quad (2)$$

non \mathbf{R}_i -k okupaturiko posizio atomikoak adierazten dituen, eta n_{at} eta V_{at} hurrenez hurren elektroien dentsitate eta Coulomb-potentzial atomikoak diren. Eraikuntza honetarako behar diren atomo askearen emaitzak, spin-dentsitate lokalaren hurbilketa barneko dentsitate autobateragarriko kalkuloprograma baten bidez kalkulatu dira [3].

Hiru dimentsioko Schrödinger ekuazioa ebazteko elementu-finitutako teknikak erabili daitezke [4]. Sare perfektuaren kasurako, egocera hedakorrekiko muga-baldintzetarako, Wigner-Seitz poliedroaren gainazalean uhin-funtzioaren lehen deribatuaren anulazioa erabili da. Akatsen kasurako, berriz, uhin-funtzioaren nulutasuna poliedro simetrikoki handi baten gainazalean eskatzen da. Praktikan, poliedro horren gainazala akats-zentritutik gutxienez 2 sare konstantetara kokatzen da.

Hiru dimentsioko Schrödinger ekuazioaren soluzioak energi-autobalioa eta uhin-funtzioa ematen ditu. Uhin funtzioa ezagutuz gero, dentsitate lokalaren hurbilketa barne-positroiaren deuseztapen-abiadura ondoko adierazpenaren bidez kalkula daitezke:

$$\lambda_{LDA} = \int dr |\Psi_+(r)|^2 \Gamma(n(r)) \quad (3)$$

non $\Gamma(n(r))$ deuseztapen abiadura lokala den. Kalkulu hori burutzeko bi bide har daitezke:

a) Deuseztapen-abiadura lokala osagaietan zatitu, $n_V(r)$ eta $n_C(r)$ balentzi eta barne "core" elektroiaren dentsitateak izanik. Lehenbizikoa, Brandt-Reinheimeren adierazpenaz hurbil daitezke [5]:

$$\Gamma_V(n_V) = \pi r_0^2 c \left[1 + \frac{r_s^3 + 10}{6} \right] \quad (4)$$

non r_0 elektroiaren erradio klasi-koa den, c argiaren abiadura eta $r_s = (3/4 \pi n_V)^{1/3}$

Barne-elektroiaren kasurako,

$$\Gamma_C(n_C) = \pi r_0^2 c n_C \gamma_C$$

partikula independenteen eredua

γ_C gehikuntz faktoreaz biderkatutik erabiltzen da. Barne-elektroiaren kasurako gehikuntz faktore horrek, balentzi elektroiari dagokiena baino txikiagoa behar du izan, eta erabilakoa Bonderup eta al.-ek [6] estimaturiko $\gamma_C \approx 1,5$ balioa izan da. Metal sinpletan barne-eta balentzi elektroiak erraz bereiz daitezke, baina trantsizio-metaletan edo metal nobleetan, d barne-elektroi polarizakorrak tartean daudenean banaketa ez da hain argia. Kasu

honetan, d elektroiatarako, egokitu beharreko γ_C parametroa erabiltzen da [1]. Egokitzapen hori, sare perfektuan kalkulaturiko balioa esperimentalarekin bat etor dadin egiten da.

b) Bigarren bide honetan, mota desberdinetako elektroi guztiak LDA hurbilketa barnean hartzen dira, hots, egokitu beharreko parametrorik gabeko "ab initio" kalkulua erabiltzen da [7]. Jensen-ek [7] honela kalkulaturiko positroien bizidenez sare perfektuetan esperimentalki lorturiko balioekin % 10eko tartez bat datozke frogatu du.

Ondoko taulan, bi eratako kalkuluen bidez Al-matrizeko hutsunea-Li konplexu desberdinetan (ikus 1. irudia) lorturiko balioak ($\tau(a)$ lehen bideari dagokiona eta $\tau(b)$ bigarrenari) aurkezten dira. Halaber, taulan b) ereduko kalkulua arabera, balentzi eta barne-elektroiari dagozkien batezbesteko gehikuntz faktoreak, γ'_V eta γ'_C , adierazten dira hurrenez hurren. Taulak akats-mota bakoitzari dagokion E_b lotura-energia adierazten du, hots, sare perfektu eta akats-konkretuaren arteko autobalioen diferentzia.

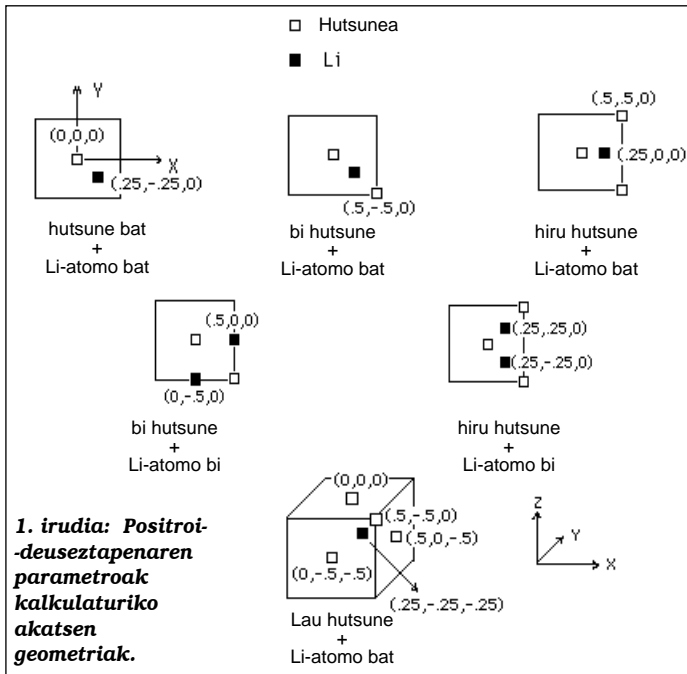
| Akats-mota | E_b (ev) | τ (a) (ps) | γ_C | τ' (b) (ps) | γ'_V | γ'_C |
|-------------|------------|--------------------|------------|---------------------|-------------|-------------|
| Al | | 171 | 1.5 | 168 | 4.125 | 2.344 |
| 1-huts.+1Li | +0.15 | 186 | 1.5 | 183 | 4.334 | 2.503 |
| 2-huts.+1Li | -1.31 | 227 | 1.5 | 223 | 5.013 | 2.623 |
| 3-huts.+1Li | -2.73 | 257 | 1.5 | 254 | 5.648 | 2.480 |
| 2-huts.+2Li | -1.28 | 231 | 1.5 | 227 | 5.108 | 2.523 |
| 3-huts.+2Li | -1.29 | 226 | 1.5 | 222 | 5.004 | 2.618 |
| 4-huts.+1Li | -2.84 | 262 | 1.5 | 257 | 5.797 | 2.901 |

Taulak, balentzia eta barne-elektroiaren gehikuntz faktoreen batezbestekoa ere adierazten du:

$$\gamma'_x = \lambda_x / \lambda_x^{IPM} \quad (5)$$

non x ikurrak V (balentzia) edo c (barne-) adierazten duen. λ_x deuseztapen-abiadura partziala ondokoa da:

$$\lambda_x = \int dr |\Psi_+(r)|^2 \Gamma(n(r)) (n_x(r) / n(r)) \quad (6)$$




non n_x , x motako elektroi-dentsitatea den, eta partikula independenteko ereduaren (IPM) deuseztapen-abiadura (gehikuntz faktorerik gabea) ondokoa dugu:

$$\lambda_x^{\text{IPM}} = \pi r_0^2 c \int d\mathbf{r} |\Psi_+(\mathbf{r})|^2 n_x(\mathbf{r}) \quad (7)$$

(6). adierazpenak gelaxka-unitateko puntu bakoitzeko, \mathbf{r} deuseztapen-abiadurarako x motako elektroien kontribuzio erlatiboa $n_x(\mathbf{r}) / n(\mathbf{r})$ arrazoiak emanik datorrela kontsideratzen du.

Barne-elektroiatarako lorturiko batezbesteko gehikuntz faktorea Bonderup eta al-ek [6] estimaturikoa baino handiagoa da. γ_c kalkulatzeko elektroien energiarekiko menpekotasuna kontutan ez da hartu eta ezaguna da elektroigas batean aipaturiko gehikuntza energia baxuetan baino Fermi mailaren inguruan handiagoa dela [8]. Beraz, energiaren menpekotasuna kontutan ez hartzeak barne-elektroien kontribuzio erlatiboa (energia baxuko elektroiak) hemen lorturikoa baino txikiagoa behar duela adierazten du. Aldiz, balentzi elektroien gehikuntz faktoreak, taulakoak baino handiagoak izan daitezke.

Lorturiko energi loturek argi adierazten dute Li atomo batez dekoraturiko hutsunearen kasuan izan ezik beste konplexu guztietan positroia harrapatzeko putzu sakonak sortzen direla.

Taulan adierazitako positroi-bizidengaren balioak txikiagoak dira b) ereduaren kasurako, hots, *ab initio* kalkulurako. Hala ere, bi ereduaren bidez lorturiko emaitzak oso hurbilekoak dira eta b) ereduak akats konplexuen kasurako ere baliagarria dela ondoriozta dezakegu. 

BIBLIOGRAFIA

- [1] PUSKA, M. J. and NIEMINEN, R. M., *J. Phys.F: Met.Phys.* **13**, 333 (1983).
- [2] BORONSKI, F. and NIEMINEN, R. M., *Phys. Rev.* **B34**, 3820 (1986).
- [3] GUNNARSON, O. and LUNDQUIST, B. J., *Phys. Rev.* **B13**, 4274 (1976).
- [4] Kimball, G. E. and SHORTLEY, G. H., *Phys. Rev.* **45**, 815 (1934).
- [5] BRANDT, W. and REINHEIMER, J., *Phys. Lett.* **35A**, 109 (1971).
- [6] BONDERUP, E., ANDERSEN, J. U. and LOWY, D. N., *Phys. Rev.* **B20**, 883 (1979).
- [7] JENSEN, K. O., *J. Phys.: Condens.Matter.* **1**, 10595 (1989).
- [8] ARPONEN, J. and PAJANNE, E., *Positron Annihilation*, ed. P.C. Jain, R.M. Singru and K.P. Gopinathan (Singapore: World Scientific) p. 21 (1985).