

THIẾT KẾ CHƯƠNG TRÌNH POSITRONFIT TÍNH CÁC THÔNG SỐ HỦY CỦA POSITRON TRONG KIM LOẠI VÀ HỢP KIM

Châu Văn Tạo, Mai Văn Nhơn, Trịnh Hoa Lăng
 Khoa Vật lý, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên – ĐHQG-HCM
 (Bài nhận ngày 27 tháng 11 năm 2003)

TÓM TẮT: Chương trình POSITRONFIT được thiết kế để tính các thông số hủy của positron trong kim loại và hợp kim như năng lượng hình thành nút trống đơn, nút trống đôi trong kim loại và năng lượng liên kết giữa nút trống đơn, tạp chất trong hợp kim từ lý thuyết mô hình bẫy. Chương trình được viết trên ngôn ngữ Visual Basic 6.0 chạy trên môi trường windows.

I. Cơ sở lý thuyết và mô hình thiết kế

1. Cơ sở lý thuyết

Nếu bên trong vật liệu nghiên cứu có m loại sai hỏng, thì mô hình bẫy positron trong vật liệu, theo [1] được cho bởi :

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{dn_f}{dt} &= -\sum_{j=1}^m \sigma_j C_j n_f(t) + \sum_{j=1}^m v_j n_j(t) - \lambda_f n_f(t) + N \end{aligned} \right. \quad (1)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{dn_j}{dt} &= \sigma_j C_j n_f - (v_j + \lambda_j) n_j(t) \end{aligned} \right. \quad (2)$$

với n_f, n_j lần lượt là số positron hủy ở trạng thái tự do và trạng thái bẫy; N số positron ban đầu của nguồn phát positron; σ_j tốc độ bẫy của bẫy loại j ; v_j tần suất thoát bẫy loại j ; λ_j thời gian sống của positron trong bẫy loại j .

Giải hệ phương trình (1), (2) trong điều kiện cân bằng nhiệt động với giả sử sai hỏng trong vật liệu chỉ có nút trống đơn và nút trống đôi. Theo [1], ta có :

- Năng lượng hình thành nút trống đơn trong kim loại.

$$E_v^F = \frac{k_B T_i T_j}{T_j - T_i} \left[\ln \left(\frac{I_v(T_i) - I(T_i)}{I(T_i) - I_f(T_i)} \frac{I(T_j) - I_f(T_j)}{I_v(T_j) - I(T_j)} \right) + x_v \ln \frac{T_i}{T_j} \right] \quad (3)$$

với E_v^F năng lượng hình thành nút trống đơn; k_B hằng số Boltzmann; $I_v(T_i), I_f(T_i)$ tốc độ gamma hủy ở trạng thái tự do và trạng thái bẫy tương ứng với nhiệt độ T_i, T_j .

- Năng lượng hình thành nút trống đôi trong kim loại.

$$E_d^F = \frac{k_B T_i T_j}{T_j - T_i} \left\{ \ln \left[\frac{\lambda_f(\lambda_v + v_v(T_j)) \Delta I_f(T_j) - C_v(T_j) \sigma_v(T_j) \lambda_v \Delta I_v(T_j)}{\lambda_f(\lambda_v + v_v(T_i)) \Delta I_f(T_i) - C_v(T_i) \sigma_v(T_i) \lambda_v \Delta I_v(T_i)} \right] + \right. \\ \left. + x_d \ln \frac{T_i}{T_j} + \ln \frac{\lambda_v + v_v(T_i)}{\lambda_v + v_v(T_j)} + \ln \frac{\Delta I_d(T_i)}{\Delta I_d(T_j)} \right\} \quad (4)$$

với λ_f là tốc độ hủy positron ở trạng thái tự do, σ_v tốc độ bẫy của positron tại nút trống đơn, C_v là nồng độ nút trống đơn, v_v là tốc độ thoát bẫy của positron tại nút trống đơn.

Trong kim loại có tạp chất, năng lượng liên kết giữa nút trống đơn và tạp chất B_{vi} , thông qua tốc độ hủy toàn phần I , được cho bởi

$$I = \frac{\lambda_f(\lambda_v + v_v)(\lambda_{vi} + v_{vi}) I_f + C_v \sigma_v \lambda_v (\lambda_{vi} + v_{vi}) I_v + C_{vi} \sigma_{vi} \lambda_{vi} (\lambda_v + v_v) I_{vi}}{\lambda_f(\lambda_v + v_v)(\lambda_{vi} + v_{vi}) + C_v \sigma_v \lambda_v (\lambda_{vi} + v_{vi}) + C_{vi} \sigma_{vi} \lambda_{vi} (\lambda_v + v_v)} \quad (5)$$

với σ_{vi} là tốc độ bẫy của positron tại nút trống đơn - tạp chất; C_{vi} là nồng độ nút trống đơn - tạp chất; v_{vi} là tốc độ thoát bẫy của positron tại nút trống đơn - tạp chất; $I_{vi}(T_i)$ là tốc độ gamma hủy ở nút trống đơn - tạp chất.

Trong kim loại nền có cấu trúc fcc nồng độ monovacancy C_v và nồng độ monovacancy - tạp chất C_{vi} được cho bởi $C_v = A_v(1 - 12C_i)\exp(-E_V^F / KT)$, $C_{vi} = A_{iv}12C_i \exp(-E_V^F / KT)\exp(B_{vi} / KT)$. Với C_i là phần trăm của tạp chất; A_v, A_{vi} là các hằng số phụ thuộc vào từng kim loại.

2. Thiết kế chương trình

Từ cơ sở lý thuyết trên và dữ liệu là tốc độ của gamma hủy theo nhiệt độ được đo bằng phương pháp tương quan góc ($\theta = 0, I = F(T)$), với một số điều kiện tuyến tính ta định dạng tốc độ gamma hủy theo nhiệt độ (phụ thuộc tuyến tính hoặc là hằng số theo nhiệt độ). Chương trình được xây dựng gồm 3 phần:

Phần 1. Nhập, xuất dữ liệu. Phần nhập dùng để nhập dữ liệu tính toán (nhập tốc độ của gamma hủy theo nhiệt độ) và lưu thành file dữ liệu thô (dữ liệu chưa tính) dạng txt. Phần xuất dữ liệu dùng để xuất những số liệu đã được tính.

Phần 2. Xử lý các dữ liệu nhập gồm các chương trình tính, tính năng lượng hình thành nút trống đơn, nút trống đôi, năng lượng liên kết nút trống đơn - tạp chất, fit các tốc độ của gamma hủy ở trạng thái tự do và trạng thái bẫy, tính các sai số...

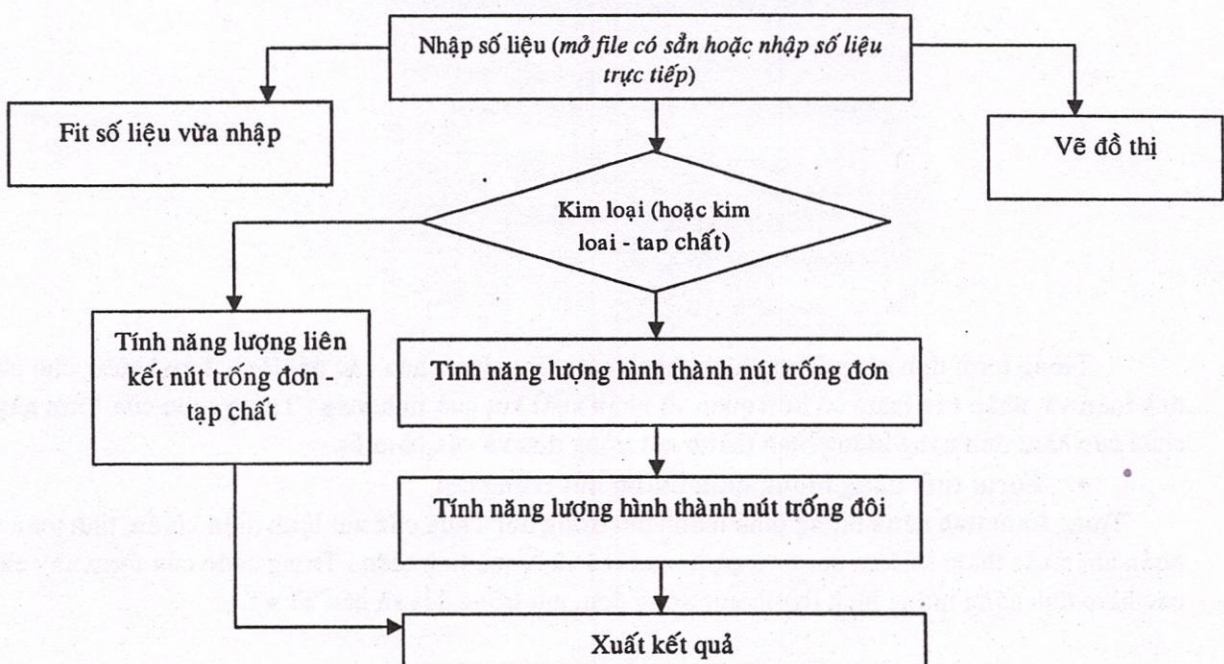
Phần 3. Vẽ các đồ thị như đồ thị tốc độ của gamma hủy, nồng độ nút trống theo nhiệt độ v.v..

II. Lưu đồ thuật giải

Từ cơ sở lý thuyết tính toán ở phần trên chúng tôi xây dựng một số thuật toán cho phần xử lý số liệu gồm các hàm fit, hàm tính năng lượng hình thành nút trống đơn, nút trống đôi, năng lượng liên kết nút trống đơn và tạp chất.

- Hàm fit số liệu: Bao gồm các hàm fit tuyến tính hoặc là hằng số theo nhiệt độ cho số liệu ghi nhận tốc độ hủy.
- Hàm tính năng lượng hình thành nút trống đơn: Bao gồm các hàm tính năng lượng hình thành nút trống đơn, hàm tính sai số, ước lượng năng lượng.
- Hàm tính năng lượng hình thành nút trống đôi: Bao gồm các hàm tính năng lượng hình thành nút trống đôi, hàm tính sai số, ước lượng năng lượng.
- Hàm tính năng lượng liên kết nút trống đơn - tạp chất: Bao gồm các hàm tính năng lượng liên kết nút trống đơn - tạp chất, hàm tính sai số, hàm tính các thông số liên quan.

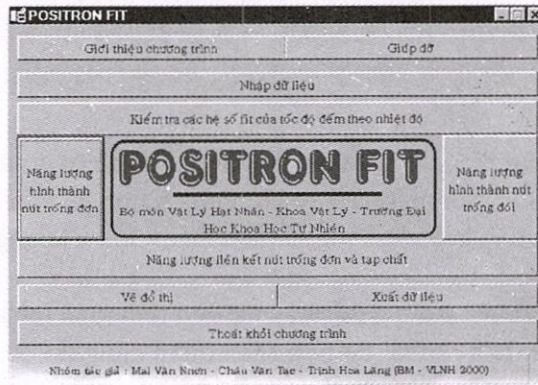
Lưu đồ tổng quát của chương trình POSITRONFIT



III. Tổng quan về chương trình positron fit

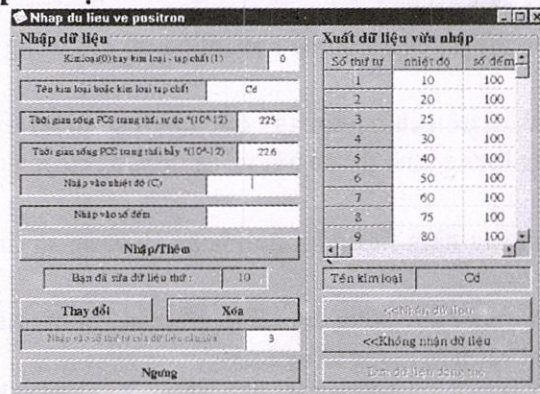
Chương trình gồm 17 form, 4 form dialog và một module [3]. Dưới đây là các form quan trọng của chương trình:

- Form chính



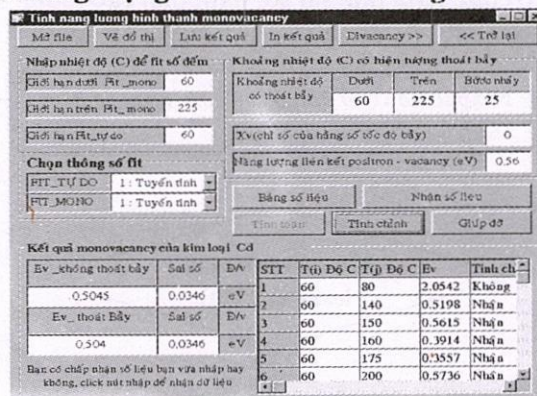
Trong form chính chứa các nút lệnh và các lệnh điều khiển và liên kết với các phần khác của chương trình.

- Form nhập dữ liệu



Trong form nhập chứa các phần nhập dữ liệu và các nút lệnh điều khiển và code của form nhập chứa các lệnh nhập dữ liệu.

- Form tính năng lượng hình thành nút trống đơn



Trong form tính năng lượng hình thành nút trống đơn chứa các nút lệnh điều khiển, cho phép tính toán và nhập các tham số liên quan và phần xuất kết quả tính toán. Trong code của form này chứa các hàm tính năng lượng hình thành nút trống đơn và các hàm fit.

- Form tính năng lượng hình thành nút trống đôi

Trong form tính năng lượng hình thành nút trống đôi chứa các nút lệnh điều khiển, tính toán và phần nhập các tham số liên quan và phần xuất các kết quả tính toán. Trong code của form này chứa các hàm tính năng lượng hình thành nút trống đơn, nút trống đôi và các hàm fit.

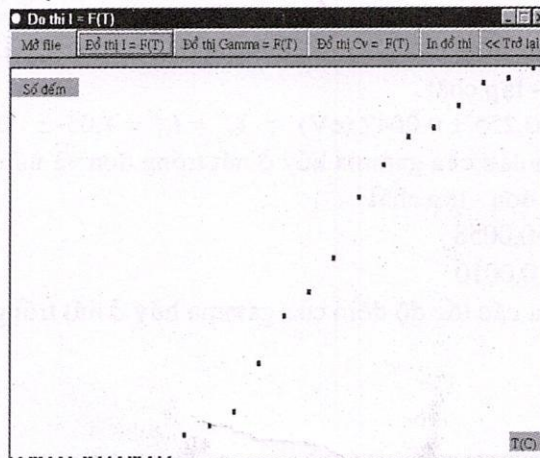
Năng lượng hình thành divacancy	Số vị	Đơn vị	STT	Năng lượng	Ed Tinh chỉnh
0.8183	0.1123	eV	1	0.8463	
			2	0.6112	
			3	0.9973	

- Form tính năng lượng liên kết nút trống đơn và tạp chất

Nhiệt độ C	Số đếm
200	101.5
250	101.8
300	102.2
350	102.7
400	103
450	103.3

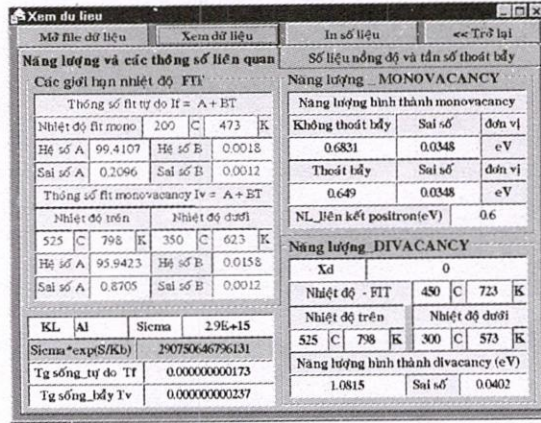
Trong form tính năng lượng liên kết nút trống đơn - tạp chất chứa các nút lệnh điều khiển, tính toán và phần nhập các tham số liên quan. Trong code của form tính năng lượng liên kết nút trống đơn - tạp chất chứa các hàm điều khiển và tính toán như hàm tính $A_{v\sigma_v}/\lambda_v$, $A_{v_i\sigma_{v_i}}/\lambda_{v_i}$ và năng lượng liên kết nút trống đơn- tạp chất.

- Form vẽ đồ thị



Trong form vẽ đồ thị chứa các nút lệnh điều khiển và một picture để vẽ các đồ thị. Trong code của form đồ thị chứa các hàm vẽ đồ thị.

- Form xuất các kết quả đã tính toán



Trong form này chứa các nút lệnh và các bảng xuất kết quả. Trong code của form chỉ chứa những dòng lệnh xuất các kết quả đã tính.

IV. Một số kết quả tính toán

1. Năng lượng hình thành nút trống đơn trong kim loại fcc và hcp[1]

Kim loại	Cd	Pb	Zn	Al	Cu
E_v^F (eV)	$0,524 \pm 0,021$	$0,548 \pm 0,059$	$0,625 \pm 0,020$	$0,670 \pm 0,055$	$1,276 \pm 0,256$
E_v^{*F} (eV)	$0,523 \pm 0,021$	$0,540 \pm 0,050$	$0,624 \pm 0,020$	$0,633 \pm 0,055$	$1,134 \pm 0,256$

2. Năng lượng hình thành nút trống đôi trong kim loại fcc và hcp

Kim loại	E_d^F (eV)		
	$X_d = 0$	$X_d = 0,35$	$X_d = 0,5$
Cd	$0,9800 \pm 0,0718$	$0,9672 \pm 0,0718$	$0,9616 \pm 0,0718$
Pb	$0,9289 \pm 0,0314$	$0,9141 \pm 0,0312$	$0,9078 \pm 0,0312$
Zn	$1,0781 \pm 0,3038$	$1,0594 \pm 0,3040$	$1,0514 \pm 0,3041$
Al	$1,0541 \pm 0,0215$	$1,0345 \pm 0,0213$	$1,0261 \pm 0,0213$
Cu	$2,1901 \pm 0,3932$	$2,1539 \pm 0,3934$	$2,1384 \pm 0,3934$

3. Thông số hủy positron trong kim loại - tạp chất (Cu 5% tạp chất Ge)

$$\frac{A_v \sigma_v}{\lambda_f} = 9,93 \cdot 10^5; \quad \frac{A_{vi} \sigma_{vi}}{\lambda_f} = 2,75 \cdot 10^5 [5]$$

A_v, A_{vi} là các hằng số; λ_f thời gian sống của positron ở trạng thái tự do; σ_v, σ_{vi} là tốc độ bẫy positron ở nút trống đơn và nút trống đôi - tạp chất.

$$B_{vi} = 0,255 \pm 0,0047 \text{ (eV)} ; I_v^0 = I_{vi}^0 = 1,05 \pm 0,0177$$

I_v^0, I_{vi}^0 lần lượt là tốc độ đếm ban đầu của gamma hủy ở nút trống đơn và nút trống đôi - tạp chất.

B_{vi} năng lượng liên kết nút trống đơn - tạp chất

- $\alpha_v = 0,2062 \pm 0,0058$
- $\alpha_{vi} = 0,1188 \pm 0,0010$

α_v, α_{vi} là các hệ số tuyến tính của các tốc độ đếm của gamma hủy ở nút trống đơn và nút trống đôi - tạp chất theo nhiệt độ.

Kết luận

Với chương trình POSITRONFIT được viết bằng ngôn ngữ Visual Basic 6.0 [4], có thể tính các thông số hủy positron trong kim loại và hợp kim của một số kim loại. Các kết quả tính được xử lý nhanh. Ngoài ra chương trình còn cung cấp giao diện linh hoạt, tiện ích, dễ dàng thu nhận và truy xuất dữ liệu. Trong tương lai sẽ khai triển và mở rộng chương trình để tính các thông số vật lý cho các loại sai hỏng khác trong kim loại cũng như trong hợp kim nhiều thành phần.

DESIGNING THE POSITRON FIT PROGRAM TO CALCULATE ANNIHILATION PARAMETERS OF POSITRON IN METALS AND ALLOYS

Chau Van Tao - Mai Van Nhon - Trinh Hoa Lang
Faculty of Physics, University of Natural Sciences – VNU-HCM

ABSTRACT: *The POSITRONFIT program is designed to calculate annihilation parameters of positron in metals and alloys. It bases on theory of positron trapping model. With this program, the formation energy of monovacancy, of divacancy and bound energy monovacancy - impurity atoms... in metal is calculated. This program was written in Visual Basic 6.0 and was run in Windows software.*

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Châu Văn Tạo, *Áp dụng positron trong nghiên cứu khuyết tật của kim loại và hợp kim*, luận văn thạc sĩ, trường Đại học Khoa học Tự nhiên ĐHQG-HCM, 1996
- [2] Philip R. Bevington, D. Keith Robinson, *Data reduction and error analysis for the physical sciences*, 1994
- [3] Trịnh Hoa Lăng, *Áp dụng mô hình bẫy tính các thông số hủy positron trong kim loại fcc và hcp*, luận văn tốt nghiệp, trường Đại học Khoa học Tự nhiên ĐHQG-HCM, 2001
- [4] Nguyễn Hữu Anh, *Microsoft Visual Basic 6.0 & Lập trình cơ sở dữ liệu*, NXB Giáo Dục, 2001
- [5] Châu Văn Tạo, *Nghiên cứu sự hủy positron trong kim loại và hợp kim*, luận án tiến sĩ Vật lý, 2002