

ÁP DỤNG MÔ HÌNH BẦY POSITRON CÓ TÍNH ĐẾN SỰ THOÁT BẦY CỦA MONOVACANCY TÍNH NĂNG LƯỢNG LIÊN KẾT CỦA TẠP CHẤT TRONG HỢP KIM Cu-0.5%at.Ge

Châu Văn Tạo

Trường Đại Học Khoa Học Tự Nhiên

(Bài nhận ngày 08/12/1999)

TÓM TẮT: Bằng cách áp dụng mô hình bầy positron cho kim loại Cu với sự có mặt của Monovacancy, có tính đến hiệu ứng thoát bầy của positron đối với monovacancy, năng lượng hình thành monovacancy trong kim loại Cu đã được tính trong trường hợp này là $E_F^{v*} = 0.89 \pm 0.12$ eV. Áp dụng giá trị năng lượng hình thành monovacancy trong trường hợp không có hiệu ứng thoát bầy là $E_F^v = 1.17 \pm 0.10$ eV này vào hợp kim Cu-0.5% at Ge, năng lượng liên kết của monovacancy và tạp chất Ge được tính là $B_{vi} = 0.27 \pm 0.10$ eV. Những kết quả tính được trong bài báo là rất có ý nghĩa trong việc khảo sát cấu trúc bền vững của hợp kim Cu-0.5% at Ge và nó còn làm nền tảng về mặt lý thuyết trong việc áp dụng phương pháp hủy positron để khảo sát các hợp kim khác của Cu.

I. MÔ HÌNH BẦY POSITRON TỔNG QUÁT TRONG KIM LOẠI VÀ HỢP

KIM :

Tốc độ bầy của positron được quyết định qua hai ảnh hưởng :

-Positron phải di chuyển tới trạng thái bầy , ở nhiệt độ đủ cao positron đã bị nhiệt hóa chuyển động trong môi trường có thể được mô tả bởi sự khuếch tán

-Khi positron đến bầy thứ j thì positron phải nhảy vào trong bầy với tốc độ bầy là σ_j và sau đó cũng có thể thoát ra khỏi bầy với tốc độ thoát bầy v_j . Xác suất hủy của positron với sai hỏng loại j là λ_j .

Mô hình bầy tổng quát của Brand cho sự biến thiên của số positron tự do $n_f(t)$, số positron n_j tại loại bầy j .

$$\frac{dn_f}{dt} = - \sum_{j=1}^m \sigma_j C_j n_f(t) + \sum_{j=1}^m v_j n_j(t) - n_f \lambda_f \quad (1)$$

$$\frac{dn_j}{dt} = \sigma_j C_j n_f - (\nu_j + \lambda_j) n_j(t) \quad (2)$$

Trong đó C_j là nồng độ của sai hỏng loại j

Tốc độ hủy tại trạng thái sai hỏng và trạng thái tự do có thể được tính từ đại lượng nghịch đảo của thời gian sống tương ứng.

$$\lambda_f = \frac{1}{\tau_f} \quad \text{và} \quad \lambda_j = \frac{1}{\tau_j} \quad (3)$$

Với τ_f là thời gian sống của positron tự do, τ_j là thời gian sống của positron trong trạng thái bẫy j .

II ÁP DỤNG MÔ HÌNH BẦY POSITRON TÍNH CHO KIM LOẠI Cu VÀ HỢP KIM Cu-0.5%atGe

1) Tính Năng lượng hình thành monovacancy trong kim loại Cu có tính đến hiệu ứng thoát bẫy

Giả sử rằng, trong mẫu chỉ có monovacancy, khi đó phương trình (1) (2) trở thành

$$\frac{dn_f}{dt} = -\lambda_f n_f - \sigma_v C_v n_f + \nu_v n_v \quad (4)$$

$$\frac{dn_v}{dt} = -\lambda_v n_v + \sigma_v C_v n_f - \nu_v n_v \quad (5)$$

Ở đây n_f , n_v số positron ở trạng thái tự do và trạng thái bẫy tại thời điểm t

σ_v : tốc độ bẫy của positron tại monovacancy

C_v : nồng độ của monovacancy xuất hiện trong đơn vị thể tích của mẫu

λ_v , λ_f : tốc độ hủy của positron tại bẫy monovacancy và ở trạng thái tự do

Nếu như thông lượng của positron phát ra từ nguồn là không đổi theo thời gian (thời gian bán hủy của nguồn là lớn so với thời gian chiếu) thì theo trạng thái cân bằng thống kê của Doyama ta có:

$$\frac{dn_f}{dt} = \frac{dn_v}{dt} = 0 \quad (6)$$

Gọi I là số lượng tử gamma ghi được từ mẫu, I_f, I_v tương ứng là số lượng tử gamma phát ra từ sự hủy của positron với tinh thể hoàn hảo và tạp chất, chúng ta có hệ thức

$$I = \gamma_f I_f + \gamma_v I_v \quad (7)$$

Với γ_f, γ_v là xác suất positron hủy với tinh thể hoàn hảo và tại bẫy loại j

$$\gamma_f = \frac{I_f}{I_f + I_v} = \frac{\lambda_f (\lambda_v + \nu_v)}{\lambda_f (\lambda_v + \nu_v) + \lambda_v \sigma_v C_v} \quad (8)$$

$$\gamma_v = \frac{I_v}{I_f + I_v} = \frac{\lambda_v \nu_v C_v}{\lambda_f (\lambda_v + \nu_v) + \lambda_v \sigma_v C_v} \quad (9)$$

Theo [5][6] trong trạng thái cân bằng nhiệt thì nồng độ monovacancy không tính đến sự thoát bẫy của positron từ monovacancy là C_v và nồng độ monovacancy trong mẫu khi có tính đến sự thoát bẫy là C_v^* cho bởi :

$$C_v = C_o \cdot \exp\left(-\frac{E_F^V}{k_B T}\right) \quad C_v^* = C_o \cdot \exp\left(-\frac{E_F^{V*}}{k_B T}\right) \quad (10)$$

Ở đây E_F^V : năng lượng hình thành monovacancy

k_B : hằng số Boltzmann

ν_v tốc độ thoát bẫy của positron ở monovacancy nó được tính qua công thức của Seeger [1]

$$\nu_v = \frac{k_B T}{h} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{vp}}{k_B T}\right) \quad (11)$$

Ở đây ε_{vp} : năng lượng liên kết của positron tại trạng thái bẫy

h : hằng số Planck

Với các giá trị trên đưa vào phương trình (7), trong trường hợp có tính đến sự thoát bẫy, năng lượng hình thành monovacancy trong mẫu được tính

$$E_v^{F*} = \frac{KT_1 T_2}{T_1 - T_2} \left[\ln \frac{\Delta I_f^{(1)} \Delta I_v^{(2)}}{\Delta I_f^{(2)} \Delta I_v^{(1)}} + x \ln \frac{T_2}{T_1} + \ln A \right] \quad (12)$$

Với $\Delta I_f(0) = I(0) - I_f(0)$

$$\Delta I_V(0) = I(0) - I_V(0)$$

$$A = \frac{\lambda_v + v_v^{(1)}}{\lambda_v + v_v^{(2)}}$$

$\Delta I_f^{(j)}(0)$, $\Delta I_V^{(j)}(0)$, $v_v^{(j)}$ là các đại lượng tương ứng với nhiệt độ T_j , kim loại Cu theo [7] có các giá trị $\tau_v = 160.10^{-12}s$ và $\epsilon_{vp} = 0.21ev$. Với các số liệu trong [4], áp dụng các phương trình bẫy tổng quát, chúng tôi đã thu được các kết quả dưới đây E_v^F và E_v^{F*} là năng lượng hình thành monovacancy trong Cu khi không tính đến sự thoát bẫy và tính đến sự thoát bẫy của positron ở monovacancy

| $\sigma_v = \sigma_0 T^x$ | E_v^F (eV) | E_v^{F*} (ev) |
|---------------------------|--------------|-----------------|
| X= -1/2 | 1.20 ± 0.13 | 0.82 ± 0.01 |
| X= 0 | 1.17 ± 0.10 | 0.89 ± 0.01 |
| X= 1/2 | 1.23 ± 0.14 | 0.94 ± 0.02 |

Bảng 2: Các giá trị năng lượng hình thành monovacancy trong kim loại Cu trong các trường hợp phụ thuộc vào nhiệt độ khác nhau của tốc độ bẫy positron tại monovacancy

2) Năng lượng liên kết của monovacancy với Ge trong hợp kim Cu-0.5%atGe

Áp dụng mô hình bẫy cho hợp kim Cu-0.5%atGe, và xem như trong mẫu chỉ có monovacancy Sự thoát bẫy của positron từ monovacancy và những cặp monovacancy-Ge được bỏ qua khi đó (1) và (2) trở thành:

$$\frac{dn_f}{dt} = -\lambda_f n_f - \sigma_v C_v n_f - \sigma_{vi} C_{vi} n_f + N \quad (13)$$

$$\frac{dn_{vi}}{dt} = -\lambda_{vi} n_{vi} + \sigma_{vi} C_{vi} n_f \quad (14)$$

$$\frac{dn_v}{dt} = -\lambda_v n_v + \sigma_v C_v n_f \quad (15)$$

Ở đây n_f , n_v và n_{vi} là số positron tự do, số positron bị bẫy bởi monovacancy và số positron bị bẫy bởi những cặp monovacancy-Ge λ_f , λ_v và λ_{vi} là tốc độ hủy

của positron tự do, tốc độ hủy positron bởi monovacancy và tốc độ hủy của positron ở những cặp monovacancy-Ge. Trong đó σ_v và σ_{vi} là tốc độ bắt của positron bởi những monovacancy và những cặp monovacancy-Ge, C_v và C_{vi} là nồng độ tương đối của monovacancy và những cặp monovacancy-Ge. N thông lượng của positron đi vào mẫu trong một đơn vị thời gian.. Khảo sát trong điều kiện cân bằng động học thống kê

$$\frac{dn_f}{dt} = 0, \quad \frac{dn_v}{dt} = 0 \text{ và } \frac{dn_{vi}}{dt} = 0 \quad (16)$$

Tốc độ đếm gamma trùng phùng ghi được $I(0)$ ở góc $\theta=0$ do positron hủy với điện tử trong mẫu phát ra có thể được diễn tả như:

$$I(0) = \frac{\lambda_f I_f(0) + I_v(0)\sigma_v C_v + I_{vi}(0)\sigma_{vi} C_{vi}}{\lambda_f + \sigma_v C_v + \sigma_{vi} C_{vi}} \quad (17).$$

Ở đây $I_f(0)$, $I_v(0)$ và $I_{vi}(0)$ là tốc độ đếm trùng phùng ở $\theta = 0$ ứng với tất cả positron hủy trong miền tinh thể hoàn hảo, hủy ở monovacancy và hủy ở những cặp monovacancy-Ge.

Số liệu trong [3] cho thấy dưới 450°C giá trị $I(0)$ thay đổi tuyến tính theo nhiệt độ, bởi vì ở nhiệt độ thấp hầu hết positron hủy trong miền tinh thể hoàn hảo do đó nồng độ sai hỏng mạng có thể bỏ qua ở nhiệt độ thấp. Những positron trong tinh thể hoàn hảo ở những nơi giao tiếp giữa các nguyên tử do lực đẩy Coulomb gây ra bởi điện tích dương của positron và điện tích dương của ion kim loại. Mật độ điện tử ở nơi giao tiếp phụ thuộc vào sự phủ của điện tử lõi bao hàm những điện tử d . Do giãn nhiệt, sự phủ giảm khi nhiệt độ mẫu gia tăng, vì vậy đường cong parabol tương quan góc sẽ tăng. Do đó giá trị của tốc độ đếm trùng phùng ở $\theta = 0, I_f(0)$ sẽ gia tăng khi nhiệt độ mẫu gia tăng vì vậy ta có thể giả sử rằng $I_f(0)$, là phụ thuộc vào nhiệt độ gần đúng bậc nhất.

$$I_f(0) = I_f^0(0)(1 + \alpha_f T) \quad T^{\circ}\text{C} \geq 100^{\circ}\text{C} \quad (18)$$

Sự phụ thuộc vào nhiệt độ $I_v(0)$ và $I_{vi}(0)$ trong gần đúng bậc nhất trong các công trình[3][4] đã giả sử rằng chúng phụ thuộc tuyến tính vào nhiệt độ

$$I_v(0) = I_v^0(0)(1 + \alpha_v T) \quad T^0C \geq 450^0C \quad (19)$$

$$I_{vi}(0) = I_{vi}^0(0)(1 + \alpha_{vi} T) \quad T^0C \geq 450^0C \quad (20)$$

Đưa (18) (19) (20) vào (17), chúng ta có tốc độ đếm trùng phùng ở $\theta = 0$ là:

$$I(0) = \frac{I_f^0(0)(1 + \alpha_f T)\lambda_f + I_v^0(0)(1 + \alpha_v T)\sigma_v C_v + I_{vi}^0(0)(1 + \alpha_{vi} T)\sigma_{vi} C_{vi}}{A} \quad (21)$$

$$\text{Với } A = \lambda_f + \sigma_v C_v + \sigma_{vi} C_{vi} \quad (22)$$

$$I(0) = I_f^0(0)(1 + \alpha_f T) + \{[I_v^0(0) - I_f^0(0)] - [I_f^0(0)\alpha_f - I_v^0(0)\alpha_v]T\} \frac{\sigma_v C_v}{A}$$

$$+ \{[I_{vi}^0(0) - I_f^0(0)] - [I_f^0(0)\alpha_f - I_{vi}^0(0)\alpha_{vi}]T\} \frac{\sigma_{vi} C_{vi}}{A}$$

$$I(0) = I_f^0(0)(1 + \alpha_f T) + \frac{[I_v^0(0)(1 + \alpha_v T) - I_f^0(0)(1 + \alpha_f T)]\sigma_v C_v}{A}$$

$$+ \frac{[I_{vi}^0(0)(1 + \alpha_{vi} T) - I_f^0(0)(1 + \alpha_f T)]\sigma_{vi} C_{vi}}{A}$$

$$I(0) = I_f^0(0)(1 + \alpha_f T) + \Delta I_v^0(0)(1 - \beta_v T) \frac{\sigma_v C_v}{A} \quad (23)$$

$$+ \Delta I_{vi}^0(0)(1 - \beta_{vi} T) \frac{\sigma_{vi} C_{vi}}{A}$$

Ở đây

$$\Delta I_v^0 = I_v^0(0) - I_f^0(0) \quad \text{và} \quad \Delta I_{vi}^0 = I_{vi}^0(0) - I_f^0(0)$$

$$\beta_v = \frac{[I_f^0(0) - I_v^0(0)\alpha_v]}{\Delta I_v^0} \quad \text{và} \quad \beta_{vi} = \frac{[I_f^0(0) - I_{vi}^0(0)\alpha_{vi}]}{\Delta I_{vi}^0}$$

Ở điều kiện cân bằng nhiệt độ, nồng độ của monovacancy và những cặp monovacancy-tạp chất theo [3], [4] được cho bởi:

$$C_v = A_v(1 - 12C_i) \exp\left(-\frac{E_v^F}{kT}\right) \quad (24)$$

$$C_{vi} = 12C_i A_{vi} \exp\left(-\frac{E_v^F - B_{vi}}{kT}\right) \quad (25)$$

Ở đây C_i là nồng độ của tạp chất, E_v^F là năng lượng hình thành monovacancy, B_{vi} là năng lượng liên kết monovacancy và Getrong Cu-0.5%atGe

Với gần đúng bậc không $I_v^0(0) = I_{vi}^0(0)$ chúng ta có: $\beta_v = \beta_{vi} = 0$ và $\alpha_v = \alpha_{vi} = 0$, đưa các đại lượng này vào các phương trình (19), (20), (21) và (23) chúng ta tìm được các giá trị sau:

$$B_{vi} = 0.27 \pm 0.1 \text{ (eV)}$$

$$I_v^0(0) = 1.091 \pm 0.005 \text{ sd/s}$$

$$I_{vi}^0(0) = 1.091 \pm 0.055 \text{ sd/s}$$

$$\frac{A_v \sigma_v}{\lambda_f} = (9.1 \pm 1.2) \cdot 10^5$$

$$\frac{A_{vi} \sigma_{vi}}{\lambda_f} = (8.6 \pm 1.5) \cdot 10^5$$

Giá trị năng lượng liên kết giữa một monovacancy và Germanium tính được phù hợp với giá trị tính bởi D.lazarus. Từ các giá trị trên với áp dụng tính gần đúng bậc nhất với sự phụ thuộc vào nhiệt độ của $I_f(0)$, $I_v(0)$, $I_{vi}(0)$, như sau:

$$I_f(0) = I_f^0(0)(1 + \alpha_f T) \text{ khi } T \geq 100^{\circ}\text{C}$$

$$I_v(0) = I_v^0(0)(1 + \alpha_v T) \text{ khi } T \geq 450^{\circ}\text{C}$$

$$I_{vi}(0) = I_{vi}^0(0)(1 + \alpha_{vi} T) \text{ khi } T \geq 450^{\circ}\text{C}$$

Với $\lambda_f = 7.6 \cdot 10^9 \text{ sec}^{-1}$ các phương trình (23), (24), (25) và các giá trị có được ở trên, chúng ta có thể rút ra các giá trị sau:

$$\alpha_f = (8.0 \pm 0.2) \cdot 10^{-5}$$

$$\alpha_v = 0.043 \pm 0.015$$

$$\alpha_{vi} = 0.140 \pm 0.020$$

$$I_f^0(0) = (97.73 \pm 0.51) \text{ sd/s}$$

III KẾT LUẬN

Từ các giá trị của năng lượng hình thành monovacancy và năng lượng liên kết của monovacancy với tạp chất Ge trong hợp kim Cu-0,5%atGe tính được trong bài báo, các nồng độ của monovacancy trong kim loại Cu cũng như nồng độ của sự kết hợp giữa monovacancy và tạp chất trong hợp kim Cu-0,5%atGe được rút ra

và điều này có ý nghĩa rất lớn trong việc nghiên cứu cấu trúc bền vững của kim loại và hợp kim trên, nó cũng đưa ra phương pháp để có thể khảo sát các tham số trên cho kim loại và hợp kim khác. Với gần đúng bậc nhất chúng ta có thể tính toán sự phụ thuộc vào nhiệt độ của tốc độ đếm trùng phùng ở $\theta = 0$, $I_f(0)$, $I_v(0)$, $I_{vi}(0)$, khi positron hủy trong miền tinh thể hoàn hảo, hủy ở monovacancy, ở những cặp monovacancy-Ge trong Cu-0.5%atGe, điều này rất có ý nghĩa khi tính đến sự có mặt của divacancy và tính năng lượng hình thành divacancy mà tác giả trình bày trong bài báo khác. Tác giả xin gửi lời cảm ơn đến viện Vật lý ICTP (Italy), Melbourne University và viện SCIRO của Australia cho tôi đến làm việc và có được những số liệu vô cùng hữu ích

APPLICATION OF THE POSITRON TRAPPING MODEL WITH DETRAPPING EFFECT TO ESTIMATE THE BINDING ENERGY OF MONOVACANCY WITH IMPURITY IN ALLOY Cu-0.5%atGe

Chau Van Tao

ABSTRACT: By applying the positron trapping model (PTM) with detrapping effect, the formation energy of monovacancy in metal copper is calculated 0.89 ± 0.12 (eV), this value is used to estimate the binding energy of monovacancy with atom Ge in alloy Cu-0.5%atGe which is 0.27 ± 0.01 (eV). These results are valuable in studies of structures and physical properties of metal Cu and its alloys

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Alfred Seeger, Journal of physics F (metal physics) 3 (1973) pp 248
- [2]. Maosao Doyama and R.R Hasiyuti - Study of lattice defects by mean of positron annihilation 148-V4 (1989)
- [3]. Chau Van Tao – Xiong Liang Yeu “The positron trapping model for studying Cu and Cu-0.5%at.Ge” Preprint ICTP 382/1993
- [4]. Chau Van Tao “ Áp dụng positron trong nghiên cứu khuyết tật của kim loại và hợp kim” Luận án ThS 1996 ĐHKHTN TP. HCM

[5]. Chau Van Tao, Kieu Tien Dung "the positron trapping model with detrapping effect for calculating the formation energy of monovacancy in some metals" Preprint Melbourne University of Australia 12/1998

[6]. Châu Văn Tạo, Mai Văn Nhơn, Phạm Anh Tú " Áp dụng mô hình bẫy positron có tính đến sự thoát bẫy .Tính năng lượng hình thành monovacancy trong một số kim loại" Tạp chí Phát triển Khoa học và công nghệ, tập 1 số 5 - 1998

[7]. Chau Van Tao, Mai Van Nhon, Pham Anh Tú "Application of the positron trapping model with detrapping effect to study concentration of monovacancy in metal Cu" Journal of Science & technology development, 9 V2, No 1-1999