

ÁP DỤNG MÔ HÌNH BẦY CÓ TÍNH ĐẾN SỰ THOÁT BẦY TÍNH NỒNG ĐỘ MONOVACANCY TRONG KIM LOẠI CU

Châu Văn Tạo - Mai Văn Nhơn - Phạm Anh Tú.

Trường Đại Học Khoa Học Tự Nhiên

(Bài nhận ngày 07/11/1998)

TÓM TẮT: Bằng cách áp dụng mô hình bầy positron tại trạng thái monovacancy không tính đến sự thoát bầy năng lượng hình thành monovacancy trong Cu là 1.28 eV và khi tính đến sự thoát bầy thì năng lượng hình thành monovacancy trong Cu là 0.76 eV . Từ các kết quả đó cho thấy tỉ số nồng độ monovacancy khi tính đến thoát bầy và không tính đến thoát bầy trong Cu là tương đối lớn, do đó sự thoát bầy không thể bỏ qua trong việc áp dụng phương pháp hủy positron để tìm nồng độ monovacancy trong Cu khi đo tại nhiệt độ cao.

I. MÔ HÌNH BẦY POSITRON ÁP DỤNG CHO MONOVACANCY TRONG KIM LOẠI:

Trong nghiên cứu sai hỏng của kim loại và hợp kim, một trong những sai hỏng mà vật lý quan tâm là sai hỏng ở nút mạng, nghĩa là nguyên tử nút mạng bị đánh bật ra khỏi vị trí của nó và tạo thành những monovacancy. Một trong những phương pháp ngày nay đang được sử dụng để nghiên cứu hiện tượng monovacancy là bức xạ phát ra từ sự hủy positron khi gặp các điện tử của nguyên tử môi trường

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

-Positron phải di chuyển tới trạng thái bầy , tại 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 ν_j

Trong những nghiên cứu về kim loại với sự sai số cho phép và đơn giản hóa bài toán chúng tôi giả sử rằng chỉ có monovacancy được hình thành trong mẫu. Với giả sử này mô hình bầy tổng quát của Brand [1] trở thành:

$$\frac{dn_f}{dt} = -\lambda_f n_f - \sigma_v C_v n_f + \nu_v n_v + N \quad (1)$$

$$\frac{dn_v}{dt} = -\lambda_v n_v + \sigma_v C_v n_f - \nu_v n_v \quad (2)$$

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

σ_v, ν_v : tốc độ bẫy của monovacancy và tốc độ thoát bẫy của positron tại monovacancy

C_v : nồng độ bẫy monovacancy

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

N : thông lượng positron từ nguồn

Theo điều kiện cân bằng thống kê của Doyama 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:

$$\frac{dn_f}{dt} = \frac{dn_v}{dt} = 0 \quad (4)$$

$$\gamma_f = \frac{I_f}{I_f + I_v} = \frac{\lambda_f(\lambda_v + \nu_v)}{\lambda_f(\lambda_v + \nu_v) + \lambda_v \sigma_v C_v} \quad (5)$$

$$\gamma_v = \frac{I_v}{I_f + I_v} = \frac{\lambda_v \nu_v C_v}{\lambda_f(\lambda_v + \nu_v) + \lambda_v \sigma_v C_v} \quad (6)$$

Thời gian sống của positron đối với m loại bẫy cho bởi:

$$\tau = \tau_f \gamma_f + \sum_{j=1}^m \tau_j \gamma_j \quad (7)$$

Thời gian sống của positron tại monovacancy:

$$\tau = \frac{\lambda_v + \nu_v + \sigma_v C_v}{\lambda_f(\lambda_v + \nu_v) + \lambda_v \sigma_v C_v} = \frac{\tau_f [1 + (\nu_v + \sigma_v C_v) \tau_v]}{1 + \sigma_v \tau_v + \tau_f \sigma_v C_v} \quad (8)$$

Ở đây:

$$\tau_f = \frac{1}{\lambda_f} \quad ; \quad \tau_v = \frac{1}{\lambda_v} \quad (9)$$

i) Nếu như ν_v là nhỏ khi đó sự thoát bẫy có thể bỏ qua chúng ta có:

$$\frac{\tau - \tau_f}{\tau_v - \tau} = \tau_f \sigma_v C_v \quad (10)$$

Theo [2] trong trạng thái cân bằng nhiệt thì nồng độ monovacancy cho bởi:

$$C_v = \exp\left(\frac{S_v}{k_B}\right) \exp\left(-\frac{E_F^v}{k_B T}\right) \quad (11)$$

Ở đây E_F^v : năng lượng hình thành monovacancy

k_B : hằng số Boltzmann

S_v : entropy hình thành monovacancy, theo một số công trình nghiên cứu thì $S_v = 0.6k_B$ trong kim loại fcc và $S_v = 2k_B$ trong kim loại bcc Từ quan hệ này thì năng lượng tạo thành monovacancy có thể được đo, nếu xem positron có hai trạng thái hủy là trạng thái hủy tự do và trạng thái hủy tại bẫy thì theo Connors [2] tham số H của sự phân bố góc sẽ là:

$$H = h_f \gamma_f + h_v \gamma_v = h_f \frac{I_f}{I} + h_v \frac{I_v}{I} \quad (12)$$

Hoặc :
$$\frac{H - h_f}{h_v - H} = \frac{n_v \lambda_v}{n_f \lambda_f + n_v \lambda_v} \quad (13)$$

Do đó ta có sự tương quan sau :

$$\frac{\tau - \tau_f}{\tau_v - \tau} = \frac{H - h_f}{h_v - H} = \frac{n_v \lambda_v}{n_f \lambda_f + n_v \lambda_v} \quad (14)$$

- Khi σ_v là không phụ thuộc nhiệt độ :

$$Ln \frac{H - h_f}{h_v - H} = - \frac{E'_F}{kT} + const \quad (15)$$

- Khi σ_v phụ thuộc nhiệt độ theo $T^{1/2}$

$$Ln \frac{H - h_f}{h_v - H} = - \frac{E'_F}{kT} + \frac{1}{2} Ln T + const \quad (16)$$

ii) Khi v_v là đủ lớn tốc độ thoát bẫy không thể bỏ qua từ phương trình (8) thì :

$$\frac{\tau - \tau_f}{\tau_v - \tau} \tau_v \left(\frac{1}{\tau_v} + v_v \right) = \tau_f \sigma_v C_v^* \quad (17)$$

Từ phương trình (10) và (17)

$$\frac{C_v}{C_v^*} = \frac{\frac{\tau - \tau_f}{\tau_v - \tau}}{\left(\frac{\tau - \tau_f}{\tau_v - \tau} \right) \tau_v \left(\frac{1}{\tau_v} + v_v \right)} = \frac{1}{1 + \tau_v v_v} \quad (18)$$

Ở đây C_v^* : nồng độ monovacancy được tính khi không có sự thoát bẫy

C_v : nồng độ monovacancy khi tính đến sự thoát bẫy (nồng độ monovacancy thật

sự

trong mẫu)

τ_v : thời gian sống của positron tại monovacancy

v_v : tốc độ thoát bẫy của positron tại bẫy là monovacancy nó được tính qua công thức của Seeger (1973)

$$v_v = \frac{k_B T}{h} \exp\left(-\frac{\epsilon_{vp}}{k_B T}\right) \quad (19)$$

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

h : hằng số Planck

II TÍNH TOÁN NĂNG LƯỢNG HÌNH THÀNH MONOVACANCY:

Positron hủy với điện tử trong trạng thái bẫy ở những sai hỏng và positron huỷ ở trạng thái tự do thì các đại lượng I_f và I_v khác nhau nên từ đó các thông số hủy H cũng có giá trị khác nhau. H là đại lượng vật lý có được từ thực nghiệm như xung lượng positron, sự phân bố thời gian sống, tương quan góc hoặc từ các đặc trưng khác của quá

trình hủy phát ra. đặc trưng của h_f và h_v là khác nhau, trong mô hình của phương trình (15) và (16) chúng ta giả sử rằng sự thay đổi của H chỉ phù hợp cho các sự thay đổi của vacancy còn ảnh hưởng của các quá trình khác (như là giãn nở nhiệt của mẫu) là không đáng kể hoặc bỏ qua. Từ sự theo dõi đại lượng h qua số liệu thực nghiệm đơn giản .Positron đi vào vật chất, bị nhiệt hóa và hủy với các electron tự do hoặc các electron lõi ion

1.Năng lượng hình thành monovacancy khi không tính đến thoát bẫy trong Cu:

Do dữ liệu có được là tốc độ đếm tại $\theta = 0$ trong phép đo tương quan góc do đó thông số h_f, h_v, h là các giá trị số đếm đo được khi positron hủy tại trạng thái tự do, hủy tại monovacancy và hủy trong toàn khối. Từ các phương trình (15) và (16) qua một số biến đổi đơn giản chúng ta biểu thức tính toán năng lượng hình thành monovacancy trong trường hợp σ_v phụ thuộc nhiệt độ và không phụ thuộc nhiệt độ [5] như sau :

- Đối với trường hợp σ_v không phụ thuộc nhiệt độ :

$$E_F^V = \frac{kT_i T_j}{T_j - T_i} \log \left[\frac{[I_v - I(i)] [I(j) - I_f]}{[I(i) - I_f] [I_v - I(j)]} \right] \quad (20)$$

-Nếu như σ_v phụ thuộc nhiệt độ theo $T^{1/2}$ thì :

$$E_F^V = \frac{kT_i T_j}{T_j - T_i} \log \left[\frac{[I_v - I(i)] [I(j) - I_f]}{[I(i) - I_f] [I_v - I(j)]} \right] + \log \left(\frac{T_j}{T_i} \right)^{1/2} \quad (21)$$

Ở đây : T_i, T_j là nhiệt độ tại hai lần đo khác nhau tương ứng với số đếm là $I(i)$ và $I(j)$

Giá trị năng lượng hình thành monovacancy E_F^V trong Cu được tính dựa vào chương trình Positron.pas, và các số liệu thực nghiệm từ [2],[5] (số đếm tại $\theta = 0$) ta tính được E_F^V cho Cu trong trường hợp σ_v không phụ thuộc nhiệt độ

$$E_F^V = 1.28 \pm 0.11 \quad \text{eV}$$

Và khi σ_v phụ thuộc nhiệt độ theo $T^{1/2}$:

$$E_F^V = 1.36 \pm 0.12 \quad \text{eV}$$

2.Năng lượng hình thành monovacancy trong Cu khi tính đến thoát bẫy

Để có được năng lượng hình thành vacancy chính xác hơn thì sự tính toán trong phần trước chúng ta phải xét đến sự phụ thuộc nhiệt độ của I_f, I_v và hiệu ứng thoát bẫy. Trong phần này chúng tôi cũng dựa vào mô hình bẫy đã được trình bày trong phần I để hiệu chỉnh năng lượng hình thành vacancy khi có sự thoát bẫy xảy ra

Giá trị bão hòa I_v sẽ có giá trị thấp hơn khi hiệu ứng thoát bẫy tồn tại, do đó nếu tính đến sự thoát bẫy thì chúng ta có thể dự đoán là E_F^V sẽ có giá trị thấp hơn đối với trường hợp không tính sự thoát bẫy.

Khi tính toán năng lượng hình thành monovacancy bao hàm cả sự thoát bẫy từ phương trình (18) và (19) ta hiệu chỉnh lại năng lượng hình thành monovacancy tại mỗi nhiệt độ từ việc biến đổi thành một hàm E_F^{V*} theo E_F^V

$$E_F^{V*} = E_F^V - kT \ln(1 + \tau_v \nu_v) \quad (22)$$

với $\tau_v = 160.10^{-12}$ sec, và $\epsilon_{v,p} = 0.21$ eV đối với Cu [6][7]

E_F^{V*} : năng lượng hình thành monovacancy khi tính đến thoát bẫy .

Từ bảng 1 và công thức (22) tính theo chương trình positron.pas thì năng lượng hình thành monovacancy trong Cu khi tính đến sự thoát bẫy :

$$E_F^{V*} = 0.76 \pm 0.03 \text{ eV}$$

Và tỉ số $\frac{C_v^*}{C_v}$ tại các nhiệt độ khác nhau được cho trong bảng 1

Nhiệt độ °K	$\frac{C_v^*}{C_v}$
460	9
673	61
783	117
888	191
988	280
1098	398
1198	523
1273	669

Bảng 1 : tỉ số nồng độ monovacancy trong Cu khi tính đến thoát bẫy và khi không tính đến thoát bẫy

III.KẾT LUẬN

Bằng cách áp dụng mô hình bẫy vào kim loại Cu cho trường hợp có tính đến thoát bẫy và không tính đến thoát bẫy các năng lượng hình thành monovacancy trong các trường hợp này đã được tìm ra , kết quả năng lượng hình thành monovacancy trong Cu khi không tính đến thoát bẫy là 1,28 ev trùng với [2] , bài báo còn chỉ ra khi tính đến sự thoát bẫy thì năng lượng hình thành monovacancy trong Cu là 0,76 ev . Từ những năng lượng trên , tỉ số nồng độ $\frac{C_v^*}{C_v}$ được tính và cho thấy là tương đối lớn ở nhiệt độ cao.

Chúng tôi dự đoán điều này được dự đoán là do tại nhiệt độ cao thì tỉ số nồng độ vacancy là lớn hơn giá trị bão hòa ($\sim 10^{-4}$) , vì vậy tuy số monovacancy được tạo thành là lớn , nhưng số positron hủy ở trạng thái liên kết đã bão hòa , đồng thời tốc độ thoát bẫy tại đây cũng rất lớn , vì vậy số đếm mà đầu dò phát hiện được sẽ có giá trị bão hòa và không còn thể hiện chính xác cho nồng độ monovacancy.

**APPLICATION OF THE POSITRON TRAPPING MODEL WITH DETRAPPING EFFECT
TO STUDY CONCENTRATION OF MONOVACANCY IN METAL CU**

Chau Van Tao - Mai Van Nhon - Pham Anh Tu

ABSTRACT : By applying the positron trapping model (PTM) without detrapping effect, the formation energy of monovacancy in metal Cu is calculated 1,28 eV. If the positron trapping model (PTM) with detrapping effect is used, then the formation energy of monovacancy in metal Cu is 0,76 eV. With these formation energies the ratios of concentration monovacancy in metal Cu with and without detrapping are calculated. From the results are estimated we conclude that at high temperature the detrapping effect is not negligible

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. Maosao Doyama and R.R Hasiyuti - Study of lattice defects by mean of positron annihilation 148-V4 (1989)
- [2]. Chau Van Tao - Xiong Liang Yeu "The positron trapping model for studying Cu and Cu- 0.5%at.Ge" Preprint ICTP 382/1993
- [3]. C.H Hodges - Trapping of positrons at vacancy in metal 284-286
- [4]. Alfred Seeger - Investigation of point defect in equilibrium concentration with particular reference to positron annihilation techniques - Appl. Phys 252, 3, (1974)
- [5]. Chau Van Tao, Kieu T Dung. "The positron trapping model with detrapping effect for calculating the formation energy of monovacancy in some metals "Preprint Melbourne University of Australia" 12/98
- [6]. Alfred Seeger - The study of defects in crystals by positron annihilation - Appl Phys 196, 4, (1974)
- [7]. P.Hautojarvi and C.Corbil "Positron Spectroscopy of defects in metals and semiconductors 509 (1994)