

ÁP DỤNG MÔ HÌNH BẦY POSITRON CÓ TÍNH ĐẾN SỰ THOÁT BẦY TÍNH NĂNG HÌNH THÀNH MONOVACANCY TRONG MỘT SỐ KIM LOẠI

Châu Văn Tạo, Mai Văn Nhơn, Phạm Anh Tú

Bộ Môn Vật Lý Hạt Nhân – Trường Đại Học Khoa Học Tự Nhiên

(Nhận được ngày 18/03/1998)

Tóm tắt:

Positron bị bẫy tại trạng thái vacancy trong một số kim loại cho chúng ta tính được năng lượng hình thành vacancy trong trạng thái cân bằng nhiệt, dữ liệu có được đối với phép đo tương quan góc khe dài trong Al, Cd, In, Zn, Pb được tính toán qua mô hình bẫy trong điều kiện không có sự thoát bẫy và có sự thoát bẫy. Năng lượng hình thành vacancy khi không có thoát bẫy phù hợp với các kết quả đã được tính toán gần đây được trình bày bởi Doyama và R.R.Hsiyuti, còn năng lượng hình thành vacancy khi tính đến sự thoát bẫy thì phù hợp với sự dự đoán được cho bởi P.Hautojarvi và C.Corbet.

I. Mô hình bẫy áp dụng cho monovacancy trong kim loại

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

- Positron phải di chuyển tới trạng thái bẫy, tại nhiệt độ đủ cao positron đã bị nhiệt hóa chuyển động trong môi trường có thể mô tả bởi sự khuếch tán
- Khi positron đến bẫy thì positron phải nhảy vào trong bẫy với tốc độ bẫy là σ_j và sau đó cũng có thể thoát ra với tốc độ thoát bẫy v_j .

Trong một số công trình nghiên cứu về năng lượng hình thành monovacancy trong kim loại thì người ta thường tạo ra các mẫu mà theo sự tính toán thì nó chỉ chứa monovacancy (thông thường là nung mẫu lên khi đó số monovacancy sẽ gia tăng theo nhiệt độ), với mô hình bẫy một loại bẫy (chỉ có monovacancy):

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

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

Ở đây : n_f, n_v : số positron ở trạng thái tự do và trạng thái bẫy tại thời điểm t
 σ_v, v_v : tốc độ bẫy của bẫy monovacancy và tốc độ thoát bẫy của positron tại bẫy 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 tác động đến trạng thái ổn định 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 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 [3] trong trạng thái cân bằng nhiệt thì nồng độ monovacancy cho bởi

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

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

ngiên cứu thì $S_v = 0,6 k_B$ trong kim loại fcc và $S_v = 2 k_B$ trong kim loại bcc Từ quan hệ này thì năng lượng tạo thành mono vacancy 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 [1] tham số h của sự phân bố góc sẽ là:

$$h = h_j \gamma_j + h_v \gamma_v = h_f \frac{I_f}{I} + h_v \frac{I_v}{I} \quad (12)$$

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:

$$\text{Ln} \frac{h - h_f}{h_v - h} = -\frac{E_F^v}{kT} + \text{const} \quad (15)$$

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

$$\text{Ln} \frac{h - h_f}{h_v - h} = -\frac{E_F^v}{kT} + \frac{1}{2} \text{Ln} T + \text{const} \quad (16)$$

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 năng lượng hình thành monovacancy

Nếu như positron hủy trong trạng thái bẫy và trong trạng thái tự do thì thông số hủy h trong các phương trình mà thực nghiệm đo được sẽ có giá trị khác nhau đối với

các thông số đặc trưng của mỗi trường hợp hủy, 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 với 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 theo dõi đại lượng h số 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:

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 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:

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

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 của E_F^v được tính dựa vào chương trình Positron.pas, và các số liệu thực nghiệm trong [5] ta tính được E_F^v cho các kim loại trong trường hợp σ_v không phụ thuộc nhiệt độ và phụ thuộc nhiệt độ được cho trong bảng 1a và 1b

Bảng 1 Năng lượng tạo thành vacancy trong một số kim loại
Bảng 1a Trường hợp σ_v không phụ thuộc vào nhiệt độ

Kim loại	In	Cd	Pb	Al	Zn
E_F^v (eV)	$0,56 \pm 0,02$	$0,40 \pm 0,02$	$0,63 \pm 0,02$	$0,66 \pm 0,07$	$0,60 \pm 0,03$

Bảng 1b: Trường hợp σ_v phụ thuộc vào nhiệt độ theo $T^{1/2}$.

Kim loại	In	Cd	Pb	Al	Zn
E_F^v (eV)	$0,59 \pm 0,03$	$0,51 \pm 0,04$	$0,68 \pm 0,03$	$0,72 \pm 0,08$	$0,63 \pm 0,05$

2. Năng lượng hình thành monovacancy 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 dựa vào mô hình thoát 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 E_F^V sẽ có giá trị thấp hơn đối với trường hợp không tính sự thoát bẫy.

Khi tính toán năng lượng hình 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

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

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

Với τ_v : là thời gian sống của positron tại vacancy

ϵ_{vp} : là năng lượng liên kết của positron tại vacancy

Các giá trị τ_v và ϵ_{vp} được sử dụng từ [2.3]. Năng lượng hình thành vacancy trong một số kim loại khi tính đến thoát bẫy được trong bảng 2.

Kim loại	In	Cd	Pb	Al	Zn
E_F^V (eV)	$0,37 \pm 0,02$	$0,32 \pm 0,02$	$0,46 \pm 0,02$	$0,49 \pm 0,01$	$0,49 \pm 0,01$

Bảng 2: năng lượng hình thành monovacancy khi tính đến hiệu ứng thoát bẫy

II. Kết luận

Năng lượng hình thành monovacancy E_F^{V*} khi tính đến sự thoát bẫy được trong bảng 2 của một số kim loại thì phù hợp với sự dự đoán của P.Hautojarvi và C.Corbel [6]

APPLICATION OF THE POSITRON TRAPPING MODEL WITH DETRAPPING EFFECT TO STUDY THE FORMATION ENERGY OF MONOVACANCY IN SOME METALS

Châu Văn Tạo, Mai Văn Nhơn, Phạm Anh Tú

Abstract:

By applying the positron model (PMT) without detrapping effect, the formation energy of monovacancy in metals In, Zn, Cd, Al, Pb is calculated. If the positron trapping model (PMT) with trapping effect is used, then the formation energy of monovacancy in metals In, Zn, Cd, Al, Pb are :

$0,49 \pm 0,01\text{eV}, 0,37 \pm 0,02\text{eV}, 0,32 \pm 0,02\text{eV}, 0,49 \pm 0,02\text{eV}$ and $0,46 \pm 0,02\text{eV}$ respectively. From these results, the ratios of concentration monovacancy in estimating without and with detrapping is shown, these ratios are larger where temperatures are higher. We can conclude that the trapping effect is non negligible in applying PTM to study monovacancy in these metals.

Tài liệu tham khảo

- [1]. Maosao Doyama and R.R Hasiyuti – Study of lattice defects by mean of positron annihilation 1948 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 – 252, 3, (1974)
- [5]. Alfred Seeger – The study of defects in crystals by positron annihilation – 196, 4, (1974)
- [6]. P.Hautojarvi and C.Corbel – Positron Spectroscopy of defects in metals and semiconductors – 509 (1994)