

正电子在位错上湮没的唯象模型*

熊良钺

(中国科学院金属研究所, 沈阳)

摘 要

本文提出一个适用于可以忽略逃逸作用, 包括位错和割阶捕获的正电子多态捕获模型。着重讨论了以位错捕获为主的情况和位错心与单空位之间的开空间比, 并估算出正电子在位错心上的湮没率以及位错线上的割阶间距。

一、引 言

许多实验结果表明正电子为位错捕获后湮没和在空位上湮没所测得的寿命、 S 参数及角关联曲线都很相近^[1-6], 以测量得最多的正电子寿命为例, 文献[1]把在完整区域、在空位上和到位错捕获后的正电子寿命列成一个表, 从这个表(见文献[1]中之表1)可以看出位错捕获后的正电子寿命接近于但稍小于在空位中的。为了解释这个现象已经提出了一些模型和讨论。

M. Doyama 等人^[1,2]认为正电子是为位错上的割阶捕获并在其中湮没, 因为割阶提供了更大的开空间。并提出当正电子达到位错中心后, 它就沿位错中心非常快地扩散, 直到它找到一个位错上的吸附空位或割阶, 然后被捕获和湮没在那里。

后来 L. C. Smedskjaer 等^[6]假定: (i) 正电子与位错之间的键能很低 ($E_b \leq 0.1$ eV); (ii) 对含有位错的样品所观察到的长寿命是由于正电子在与位错相关的缺陷(如割阶)中湮没的结果。基于这两个假设, 他们取 $\lambda_d = \lambda_f(\lambda_d, \lambda_f$ 分别为正电子在位错上和完整区域的湮没速率)而认为湮没参数的一切变化都来自点缺陷。

我们觉得, 像 Smedskjaer 那样把位错只看作连接点缺陷的线是不够的。因为: (1) 低的键能可以有高的捕获率^[9], 因而位错有不可忽略的过渡到更深捕获的台阶作用; (2) 从刃位错心扩展区的开空间来考虑, λ_d 决不会等于 λ_f , 只要有正电子在位错心上湮没, 其湮没参数与完整区域的不可能相同。特别在割阶间距较大时(如在六角晶系材料中)正电子在位错心中湮没的影响更是不可忽略的。

在实验分析上, 直到现在, 对含有点阵缺陷的金属大都还是基于两态捕获模型, 多态捕获模型仍停留在一般性的讨论上^[10,11], 本文目的在于提出一个既充分考虑位错作为过渡到更深捕获的台阶作用, 也计入在位错线本身湮没的影响的正电子位错捕获模型, 从而

* 中国科学院科学基金资助的课题。

本文1987年4月10日收到。

解释一些实验现象。

二、捕获模型

为了简化计算,假定逃逸率可以忽略,并假定位错线上存在更强的捕获源——割阶,正电子在割阶上的寿命等于它在空位上的^[1]。根据这两条假定,我们提出的湮没图象如图 1 所示。在图中可能的正电子态用水平线表示,连接这些态的垂直箭头表示捕获速率,以 $2r$ 为终端的垂直箭头表示湮没速率。

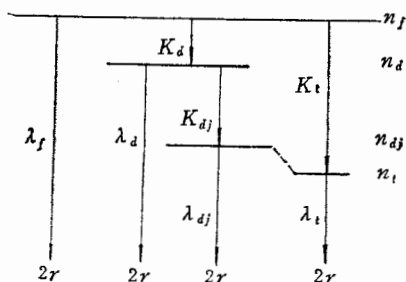


图 1 正电子在位错上的湮没图象

(图中 n_{dj} 与 n_t 之间的虚线表示,如 n_t 为单空位捕获态,则它们应在同一水平线上。当然割阶也有可能直接从自由态捕获正电子,但与从位错局域态中捕获的速率相比,可以忽略,必要时还可以计入到 n_t 态的捕获中)

图 1 可看作在固体中的热化正电子被分为三部分:第一部分在完整区域中运动并湮没;第二部分为位错所捕获,并沿着位错线运动,有一些在运动中湮没了,另一些则为位错线上的割阶进一步地捕获,局域在这个割阶中并最后湮没;第三部分则为其他的空位型缺陷捕获并湮没在那儿。

于是我们可列出下面的速率方程:

$$\begin{aligned} \frac{dn_f}{dt} &= -\lambda_f n_f - K_d n_f - K_t n_f; \\ \frac{dn_d}{dt} &= -\lambda_d n_d + K_d n_f - K_{dj} n_d; \\ \frac{dn_{dj}}{dt} &= -\lambda_{dj} n_{dj} + K_{dj} n_d; \\ \frac{dn_t}{dt} &= -\lambda_t n_t + K_t n_f. \end{aligned} \quad (1)$$

这里脚标表示正电子状态, f 相应于自由态; d 相应于位错捕获态; dj 相应于割阶捕获态; t 相应于其他捕获态。 n 是相应态所占据的几率; λ 是湮没速率; K 是捕获速率。

初始条件为: $n_f(0) = 1$; $n_d(0) = n_{dj}(0) = n_t(0) = 0$, $t = 0$ 相应于正电子完全热化的时间。

方程(1)的解如下:

$$n_f(t) = e^{-\Gamma_f t}, \quad \Gamma_f = \lambda_f + K_d + K_t; \quad (2)$$

$$n_d(t) = \frac{K_d}{\Gamma_f - \Gamma_d} (e^{-\Gamma_d t} - e^{-\Gamma_f t}), \quad \Gamma_d = \lambda_d + K_{dj}; \quad (3)$$

$$n_{d_j}(t) = \frac{K_d}{\Gamma_f - \Gamma_d} \left[\frac{K_{d_j}}{\Gamma_d - \lambda_{d_j}} (e^{-\lambda_{d_j}t} - e^{-\Gamma_d t}) - \frac{K_{d_j}}{\Gamma_f - \lambda_{d_j}} (e^{-\lambda_{d_j}t} - e^{-\Gamma_f t}) \right]; \quad (4)$$

$$n_t(t) = \frac{K_t}{\Gamma_f - \lambda_t} (e^{-\lambda_t t} - e^{-\Gamma_f t}). \quad (5)$$

在整个正电子湮没过程中,各态湮没的强度分别为:

$$I_f = \int_0^{\infty} \lambda_f n_f(t) dt = \lambda_f / \Gamma_f; \quad (6)$$

$$I_d = \int_0^{\infty} \lambda_d n_d(t) dt = K_d \cdot \lambda_d / (\Gamma_f \cdot \Gamma_d); \quad (7)$$

$$I_{d_j} = \int_0^{\infty} \lambda_{d_j} \cdot n_{d_j}(t) dt = K_d \cdot K_{d_j} / (\Gamma_f \cdot \Gamma_d); \quad (8)$$

$$I_t = \int_0^{\infty} \lambda_t n_t(t) dt = K_t / \Gamma_f. \quad (9)$$

而且有:

$$I_f + I_d + I_{d_j} + I_t = 1. \quad (10)$$

通常实验测量的结果是合成的时间谱:

$$S(x) = \lambda_f \cdot n_f(x) + \lambda_d \cdot n_d(x) + \lambda_{d_j} \cdot n_{d_j}(x) + \lambda_t \cdot n_t(x) \\ = \sum_{i=1}^4 I_i \cdot \frac{1}{\tau_i} \cdot e^{-(\frac{1}{\tau_i}) \cdot x}. \quad (11)$$

方程(11)是四个指数衰减项之和,我们称之为四个分量. 式中的 τ_i 和 I_i 分别称为这四个分量的寿命和强度,并有下列关系:

$$\tau_1 = \frac{1}{\Gamma_f} = \frac{1}{\lambda_f + K_d + K_t}, \quad (12)$$

$$I_1 = \frac{1}{\Gamma_f} \cdot \left(\lambda_f - \lambda_d \cdot \frac{K_d}{\Gamma_f - \Gamma_d} + \lambda_{d_j} \cdot \frac{K_d}{\Gamma_f - \Gamma_d} \cdot \frac{K_{d_j}}{\Gamma_f - \lambda_{d_j}} - \lambda_t \frac{K_t}{\Gamma_f - \lambda_t} \right); \quad (12')$$

$$\tau_2 = \frac{1}{\Gamma_d} = \frac{1}{\lambda_d + K_{d_j}}, \quad (13)$$

$$I_2 = \frac{K_d}{\Gamma_f - \Gamma_d} \cdot \frac{\lambda_d - \lambda_{d_j}}{\Gamma_d - \lambda_{d_j}}, \quad (13')$$

$$\tau_3 = \frac{1}{\lambda_{d_j}}, \quad (14)$$

$$I_3 = \frac{K_d}{\Gamma_f - \lambda_{d_j}} \cdot \frac{K_{d_j}}{\Gamma_d - \lambda_{d_j}}; \quad (14')$$

$$\tau_4 = \frac{1}{\lambda_t}, \quad (15)$$

$$I_4 = \frac{K_t}{\Gamma_f - \lambda_t}. \quad (15')$$

由(12)–(15)可得:

$$I_1 + I_2 + I_3 + I_4 = 1. \quad (16)$$

有时我们仅用一个平均寿命来表示这种谱,根据定义,此时平均寿命为^[11]:

$$\begin{aligned} \tau_M &= (\tau_1 \cdot I_1 + \tau_2 \cdot I_2 + \tau_3 \cdot I_3 + \tau_4 \cdot I_4) / (I_1 + I_2 + I_3 + I_4) \\ &= \frac{1}{\Gamma_f} \left[1 + \frac{K_d}{\Gamma_d} \left(1 + \frac{K_{d_j}}{\lambda_{d_j}} \right) + \frac{K_t}{\lambda_t} \right]. \end{aligned} \quad (17)$$

三、讨 论

1. 各种不同情况的位错

第一种情况:位错线不含割阶,即 $K_{d_j} = 0$, 则 $I_{d_j} = 0; I_3 = 0$, 且 $\tau_M = (1 + K_d/\lambda_d + K_t/\lambda_t)/\Gamma_f$. 也就是说变成了普通的三态捕获模型^[10,11], 此时位错线起着与其他空位型缺陷一样的捕获作用.

第二种情况:位错线含有非常高的割阶浓度,以至位错线可以描述为正电子的连续的强捕获^[8], 即 $K_{d_j} \rightarrow \infty$, 则 $I_d = 0; I_2 = 0$, 且 $\tau_M = (1 + K_d/\lambda_{d_j} + K_t/\lambda_t)/\Gamma_f$. 这里为位错所捕获的全部正电子都捕获和湮没在割阶位置, 位错线仅起着过渡到割阶捕获的台阶作用.

第三种情况:一般情形. 实际金属样品中的位错总是含有一定量的割阶, 总是间于上面两种特殊情况之间. 为了强调位错线具有过渡到更深捕获的台阶作用, (17)式可改写如下:

$$\tau_M = \frac{1}{\Gamma_f} \left[1 + \frac{K_d}{\lambda_{d_j}} (1 - \varepsilon) + \frac{K_t}{\lambda_t} \right], \quad (18)$$

这里

$$\varepsilon = (\lambda_d - \lambda_{d_j}) / (\lambda_d + K_{d_j}). \quad (19)$$

当 λ_d, λ_{d_j} 为常数时 ε 随 K_{d_j} 的增大而减小, 对上面第二种情况 ($K_{d_j} \rightarrow \infty$) 得到 ε 的最小值 $\varepsilon_{\min} = 0$; 对第一种情况 ($K_{d_j} = 0$), 得到 ε 的最大值 $\varepsilon_{\max} = (\lambda_d - \lambda_{d_j})/\lambda_d$. 一般情形, $\varepsilon_{\min} < \varepsilon < \varepsilon_{\max}$. 且 $\varepsilon/\varepsilon_{\max} = \lambda_d/(\lambda_d + K_{d_j})$ 是位错捕获的所有正电子中在位错线上湮没部分的量度.

第四种情况:材料中的位错密度非常高,使得注入的正电子全部被位错捕获. 在这种情况下测得的寿命,文献中总是处理为单一寿命^[3-7], 但按上述模型,此时仍然存在两种正电子湮没态,即 n_d 与 n_{d_j} , 这个寿命应为这两态的平均寿命,记作 τ_M^d (上标 d 标明是在正电子全部被位错捕获的情况), 根据此时的两态捕获模型^[10,11], 有

$$\tau_M^d = \frac{1}{\Gamma_d} \left[1 + \frac{K_{d_j}}{\lambda_{d_j}} \right] = \tau_v (1 - \varepsilon), \quad (20)$$

这里取了 $1/\lambda_{d_j} = \tau_v$ ^[1].

为了估算 ε 的值,由(20)式得到

$$\varepsilon = (\tau_v - \tau_M^d) / \tau_v. \quad (21)$$

这样估算得的 ε 值列于表 1. 从表 1 看,一般地说“正电子在位错上的寿命”接近于但小于空位上的寿命不是没有理由的,因为 ε 显然是个很小的正值,这也是为 (19) 式所规定

自
身
V
V
右
得
定
下
成
解
中

表 1 实验测量 τ_M^d 时的 ϵ 值

	τ_v (ps)	τ_M^d (ps)	$\epsilon = \frac{\tau_v - \tau_M^d}{\tau_v}$
Cu	180	176	0.022
Au	215	192	0.107
Al	240	228	0.050
Fe	175	169	0.034
Mo	200	175	0.125
Cd	232	211	0.091

的。

2. 位错心与单空位的开空间比 γ 的估算

首先假定: (1) 电子对正电子的屏蔽效应可以忽略; (2) 在正电子所看到的非常小的体积元内, 电子密度是均匀的。令 V_0 , V_d 和 V_v 分别为在完整区域、在位错心和在单空位上含同量电子的小体积元, 一般认为 V_d 和 V_v 要大于 V_0 , 因此可以写成 $V_d = V_0 + \Delta V_d = V_0(1 + \Delta V_d/V_0)$; 和 $V_v = V_0 + \Delta V_v = V_0(1 + \Delta V_v/V_0)$ 。所以在 V_d 和 V_v 内的电子密度分别为 $\rho_d \doteq \rho_f(1 - \Delta V_d/V_0)$ 和 $\rho_v \doteq \rho_f(1 - \Delta V_v/V_0)$ 。这里 ρ_f 是在 V_0 内的电子密度。按照

$$\lambda = \pi r_0^2 C \iiint \rho^-(r_+) \cdot \rho^+(r_+) d^3 r_+^{[12]},$$

得到

$$\lambda_d \doteq \lambda_f [1 - \Delta V_d/V_0]; \quad (22)$$

$$\lambda_v \doteq \lambda_f [1 - \Delta V_v/V_0]. \quad (23)$$

定义 γ 为位错心与单空位之间的开空间比,

$$\gamma \equiv \Delta V_d/\Delta V_v = (\lambda_f - \lambda_d)/(\lambda_f - \lambda_v). \quad (24)$$

下面表 2 中的例子将帮助我们对 γ 有一个定量的概念。

表 2 开空间比 γ 的估计

晶体	τ_f (ps)	λ_f (ns) ⁻¹	τ_d (ps)	λ_d (ns) ⁻¹	τ_v (ps)	λ_v (ns) ⁻¹	$\gamma = \frac{\lambda_f - \lambda_d}{\lambda_f - \lambda_v}$
Al ₂ O ₃ ^[13]	149	6.71	166	6.02	223	4.48	0.31
Al	163 ^[13]	6.14	183 ^[13]	5.46	240 ^[13]	4.17	0.34

3. λ_d 、 K_{d_f} 和 L (割阶间距) 的推算

一般以位错捕获为主的样品大都是范性形变后的样品, 在位错线上有很浓的割阶, 造成 K_{d_f} 很大, 于是由(13)式得到的 τ_2 只有几十个 ps 的量级, 因此难于从短寿命成分分解出 τ_1 与 τ_2 来得到 λ_d 。但是, 我们参照表 2 中的数据和刃位错心模型^[9], 假定对表 1 中的晶体都有 $\gamma = 0.32$, 则由(24)式可估算得

$$\lambda_d = \lambda_f - \gamma(\lambda_f - \lambda_v), \quad (25)$$

表3 λ_d 、 K_{dj} 和 \bar{L} 的推算结果

	$\tau_f(\text{ps})$	$\tau_e(\text{ps})$	$\lambda_d(\text{ns})^{-1}$	ε	$K_{dj}(\text{ns})^{-1}$	$\bar{L}(\text{\AA})$
Au	139	215	6.92	0.107	21.2	$4.7 \times 10^3 - 4.7 \times 10^4$
Cu	122	180	7.35	0.022	74.3	$1.3 \times 10^3 - 1.3 \times 10^4$
Al	163	240	5.51	0.050	21.3	$4.7 \times 10^3 - 4.7 \times 10^4$
Fe	117	175	7.64	0.034	74.9	$1.3 \times 10^3 - 1.3 \times 10^4$
Mo	117	200	7.41	0.125	11.9	$8.4 \times 10^3 - 8.4 \times 10^4$
Cd	199	232	4.80	0.091	0.55	$1.8 \times 10^5 - 1.8 \times 10^6$

注: 1. 除 Fe 的 τ_e 引自文献[7]外, τ_f , τ_e 的数据均引自文献[1];
2. ε 值取自表 1.

于是由(19)式得到.

$$K_{dj} = \frac{1}{\varepsilon} (\lambda_d - \lambda_{dj}) - \lambda_d. \quad (26)$$

由(25)、(26)式对 λ_d 和 K_{dj} 估计的结果列于表 3. 为了估计割阶间距, 取 $K_{dj} = f\bar{v}c_{dj}$. 这里 c_{dj} 是单位长度位错线上割阶的数目, \bar{v} 是正电子沿位错线运动的平均速度, f 是正电子在运动中通过割阶时被割阶捕获的效率. 定义割阶间距 L 为两个割阶之间的距离, 则 L 的平均值为

$$\bar{L} = 1/c_{dj} = f\bar{v}/K_{dj}. \quad (27)$$

取 $f = 0.1 - 1$, $\bar{v} \approx 10^7 \text{cm/s}^{[14]}$, 由 K_{dj} 得到 \bar{L} 的值, 并列于表 3. 从表 3 看: (1) 对立方晶系, 割阶间距约为 $10^3 - 10^4 \text{\AA}$, 这在数量级上应是合理的; (2) 对六角晶系的 Cd 割阶浓度低, 割阶间距达 $10^5 - 10^6 \text{\AA}$, 这也许是由于 Cd 的主滑移面为基面(0001), 因此在范性形变时没有产生大量割阶的缘故. 当正电子为像 Cd 那样的六角晶系中的位错捕获时, 主要是在位错心上湮没, 而不是在割阶上(与立方晶系的情况相反). 故对正电子在位错心上湮没的实验研究应寄希望于六角晶系的工作.

割阶在形变动力学中起着重要的作用, 但至今对割阶的研究还相当少. 上述讨论表明割阶浓度与正电子参数的变化有着密切的关系, 有希望用正电子技术对它作进一步的研究. 也许很多形变样品数据分散与其位错上的割阶浓度不同有关.

另外, E. Kuramoto 等^[15]曾测量了范性形变 Fe 单晶的正电子寿命, 并用通常的三态捕获模型(捕获源为割阶和空位聚集体)估计割阶间距 L , 得 $L = 36 - 360 \text{\AA}$, 他们自己认为这是太短了, 其原因可能是忽略了螺位错作为割阶捕获正电子的台阶作用. 如将 E. Kuramoto 等的的数据用上述模型进行估算, 则可得到与表 3 中 Fe 的 \bar{L} 值为同一数量级的割阶间距.

四、小 结

本文提出了一个适用于可以忽略逃逸作用的正电子位错捕获模型. 这个捕获模型既充分考虑位错作为过渡到更深捕获的台阶作用, 也计入在位错线本身湮没的影响.

在这个模型的基础上, 进一步讨论了位错心与单空位之间的开空间比, 从而估算了正

电子在位错心上的湮没速率。用文献中发表过的数据,推算了在这些位错中的割阶间距,所得数量级是合理的,因而提出了用正电子技术研究割阶浓度的可能性。

在本文酝酿期间,尤期威先生, A. Dupasquier 教授,杨奇斌与姜健等同志均分别与作者进行过有益的讨论,作者表示衷心感谢!

参 考 文 献

- [1] M. Doyama and R. M. J. Cotterill, Proc. 5th Int. Conf. on Positron Annihilation, (1979) Lake Yamanaka, Japan, p. 89.
- [2] M. Doyama, Proc. 5th Int. Conf. on Positron Annihilation, (1979) Lake Yamanaka, Japan, p. 13.
- [3] G. Dlubek, G. Brauser, O. Brummer, W. Andeejscheff, P. Manfrass, *Phys. Stat. Sol.*, (a) **30**(1975), K37..
- [4] C. L. Snead, A. N. Goland, J. H. Kusmiss, H. C. Huang, R. Meade, *Phys. Rev.*, **B3**(1971), 275.
- [5] J. Baram, M. Rosen, *Phys. Stat. Sol.*, (a) **16**(1973), 263.
- [6] S. Saimoto, B. T. A. Mckee, A. T. Stewart, *Phys. Stat. Sol.*, (a) **21**(1974), 623.
- [7] E. Kuramoto, K. Kitajima, M. Hasegawa and S. Koike, Proc. 5th. Int. Conf. Positron Annihilation, (1979) Lake Yamanaka, Japan, p. 505.
- [8] L. C. Smedskjaer, M. Manninen and M. J. Fluss, *J. Phys. F*, **10**(1980), 2237.
- [9] J. Q. Shen, C. W. Lung, K. L. Wang, Proc. 7th Int. Conf. on Positron Annihilation, (1985) New Delhi, India.
- [10] R. N. West, in *Positron in Solids*, edited by P. Hautojärvi, Topics in Current Physics, Vol. **12** (Berlin, 1979) 88.
- [11] S. Tanigawa and M. Doyama, in *Progress in the Study of Application of Electron Theory to Materials Science*, edited by M. Doyama (March, 1979) p. 1.
- [12] W. Brandt, in *Positron Solid-State Physics*, edited by W. Brandt and A. Dupasquier, (North-Holland, 1983) p. 2.
- [13] G. Brauer, F. Kerbe, Zs. Kajcsos, and A. Ashry, *Phys. Stat. Sol.*, (a) **84**(1984), 451.
- [14] Cao Chuan, Wang Yun-yu, Xiong Xing-min, Xiong Liang-yue, Jiang Jian Proc. 6th Int. Conf. on Positron Annihilation, (1982) Arlington U. S. A. p. 479.
- [15] E. Kuramoto, Y. Aono, M. Takanaka and K. Kitajima, *J. Phys. Soc. Japan*, **52**(1983), 1098.

A PHENOMENOLOGICAL MODEL FOR POSITRON TRAPPING AT DISLOCATIONS

XIONG LIANGYUE

(*Institute of Metal Research, Academia Sinica, Shenyang*)

ABSTRACT

A multi-state trapping model involving positron trapping at dislocations and jogs is proposed, in which the effect of positron detrapping can be omitted. According to this model the dislocations with variant jog density have different functions in positron Annihilation process. The case that dislocation trapping is predominant and the open-space ratio between dislocation core and single-vacancy were emphatically discussed. Using the data in some literature, we have estimated the positron annihilated rate at dislocations and the jog interval on the dislocation line. The results obtained seems reasonable.