

Міністерство освіти і науки, молоді та спорту України
Департамент освіти і науки Київської облдержадміністрації
Фастівський ліцей-інтернат

ПОЗИТРОНІЙ В КВАЗІНУЛЬМІРНИХ НАНОСИСТЕМАХ

Стаття

підготувала
вчитель фізики та астрономії
другої категорії
Науменко Оксана Вікторівна

Фастів-2014

Развивается теория парaposитрония в сферической нанопоре, находящейся в триглицеридах. Исследуется энергия связи основного синглетного состояния парaposитрония и её зависимость от радиуса нанопоры.

Розвинуто теорію пара позитронію у сферичній нанопорі, що знаходиться в тригліцеридах. Досліджується енергія зв'язку основного синглетного стану пара позитронію та її залежність від радіуса нанопори.

The theory of parapositronium in spherical nanopore in a triglycerides is developed. Studies of the binding energy of singlet state parapositronium and its dependence on the nanopore radius.

Ключевые слова: парaposитроний, синглетное состояние, кулоновское взаимодействие, нанопора.

1. Вступ

Коли в науково – популярних підручниках або в новинах пишуть про антиматерію, то безумовно говорять: як тільки антиречовина торкнеться звичайної речовини, тут же виникне анігіляція (взаємодія елементарних частинок і античастинок, внаслідок якої вони перетворюються в інші форми матерії, наприклад перетворення електрона і позитрона в пару фотонів (електрон-позитронна анігіляція). Це, звичайно, все так, але тільки зазвичай сильно наголошують на «миттєвості» цього процесу. Виникає уявлення, що якщо позитрон, який летів через вакуум, потрапить в якусь тверду мішень, то тут же – як тільки торкнеться найпершого електрона мішені – він занігілює.

Насправді, все зовсім не так. Потрапивши в речовину, позитрон може прожити яскраве і насичене подіями життя. Воно все, звичайно, може поміститися в декілька наносекунда, але для сучасної експериментальної фізики це дуже довгий проміжок часу. І за останні п'ять років фізики зуміли прослідкувати за декількома етапами цього бурного життя позитрона.

Звичайно, потрапивши в речовину і будучи оточеним з усіх боків електронами, позитрон може тут же і занігілювати. Але, як не дивно, ймовірність цього не така вже й велика. А більш імовірно, що позитрон буде раз за разом пружно сталкуватися з електронними речовинами, поступово втрачаючи свою енергію, поки в кінці кінців не термалізує. Потім він зачепить який – небудь електрон і поєднається з ним в єдину зв'язану атомоподібну систему – *позитроній Ps*.

Сам по собі позитроній, звичайно, нестабільний. Якщо його не чіпати, то електрон і позитрон самі собою проанігілюють – тобто, позитроній розпадеться на два фотона (якщо це був пара позитроній) або на три фотона (якщо це був ортопозитроній). Пара позитроній і ортопозитроній відрізняються тим, як у електрона і позитрона орієнтовані спіни відносно один одного. Здавалось б, така дрібниця, але із – за цих спінів змінюється середній час

тривалості життя позитронія. Пара позитроній живе всього 0,125 нс, а ортопозитроній в тисячу разів більше – 142 нс..

А якщо тепер позитроній знаходиться не у вакуумі, а прямо в речовині, серед атомів і молекул – чи встигне він щось зробити за цю сотню наносекунд? Встигне і немало! По – перше, він встигне багато разів зіштовхнутися з атомами і електронами. Скажімо, при швидкості 25 км/с позитроній зіштовхується з атомами з частотою сотню тисяч разів за наносекунду. Зруйнувати позитроній зовсім не так просто – адже у нього теж є енергія зв'язку, як у електронів в атомах. Тому на масштабі наносекунди він буде поводити себе просто, як нейтральний атом незвичайного, надлегкого типу.

В цій науці позитроній, як правило і називають атомом, не дивлячись на те, що у нього немає ядра. До речі, 25 км/с – це середньоквадратична теплова швидкість позитронія при кімнатній температурі.

По – друге, позитроній, дрейфуючи в речовині, може досить швидко вийти на поверхню і залишитися там – особливо, якщо мішень являється пористим кварцом, з яким зазвичай проводять такі експерименти. Це майже абсорбція на поверхні для звичайних атомів, тільки механізм дещо інший.

Це цікавий процес, тому що з точки зору енергії йому вигідно не відчепитися і полетіти у вакуум, а повертатися знову в речовину (хоча звичайно, за рахунок теплових флуктуацій він все ж таки може вилетіти). В результаті позитрон починає просто блукати по поверхні. А якщо поверхня – це маленька пора манометрового розміру, то він виявляється спійманим в порі на достатньо довгий час.

Наявність речовини поряд, звичайно, злегка (ураза в два – три) скорочують життя ортопозитронія, але все рівно в нього в запасі залишаються десятки наносекунд. Якщо, наприклад, в пористому кварці пори не ізольовані, а поєднані наноканально в загальну сіть, то «тепленький позитроній», ковзаючи по поверхні, встигає обстежити з тисячу пор. А, оскільки, позитронів в таких експериментах виникають багато і майже всі вони залазять в пори, то рано чи пізно вони наштовхнуться один на одного і починають взаємодіяти. І серед

усього цього вони можуть утворювати справжні зв'язані стани – молекулярний позитроній, молекули Ps_2 .

А далі з позитроном в атомарному або молекулярному стані, можна проводити цікаві експерименти. По – перше, можна випромінювати спектроскопію збуджених станів позитронія. Нещодавно було вперше виміряно різницю в енергії першого збудженого стану (2 p) вільного позитронія в порі. Завдяки цим вимірам було обчислено діаметр пор в пористому кварці (≈ 5 нм).

Але найцікавіше те, що можна створити бозе – конденсат із позитронів. Для цього їх потрібно накопити в порі в достатній кількості, і вони самі перейдуть в стан конденсата. Тут дуже позитивно, що позитроній легкий – він в тисячу разів легший від атома водню і в сотні тисяч легший атомів важких елементів. Із – зі цього квантовий ефект в хмарі із позитронів виражений набагато сильніше, ніж в звичайній речовині, і тому очікується, що бозе – конденсація настане за температурою набагато вище, ніж для звичайних газів.

Це було б прекрасно, але є ще один нюанс – із конденсата позитронів можна зробити гама – лазер. Один позитроній, заніглювавши, породить фотони, які можуть «стимулювати» анігіляцію в інших позитроніях. В результаті отримуємо народження гама – квантів в одному і тому ж стані – тобто найкоротший спалах когерентного гама випромінювання. Це поки що залишається мрією. Нарешті, з точки зору фундаментальної фізики позитроній виключно «чиста» система. Там немає адронів з їх складною і незрозумілою структурою, а значить властивості позитронія можна обчислити з високою точністю і порівнювати їх з даними.

2. Позитронієвий стан в нанокристалічних металах. Залежність енергетичного спектра основного та збуджених станів позитрону від параметрів задачі.

Розвинуто теорію позитронію у сферичні нанопорі, що знаходиться в тригліцеридах. Досліджується енергія зв'язку основного синглетного стану позитронію та її залежність від радіуса нанопори.

Було розглянуто просту модель квазі – нуль вимірної просторової структури, в якій використано для аналізу така умова заряду: локалізація носіїв поблизу сферичної межі розподілу двох діелектричних середовищ. Ця модель складається з сферичної наночастинки (НЧ) з радіусом a та проникненістю ϵ_2 , дисперговані в діелектричному середовищі з діелектричною проникненістю ϵ_1 . Квазічастинки із зарядом e і ефективною масою m рухаються в кристалі. В результаті аналітичний вираз було отримано для поляризації взаємодії $U(r,a)$, яка виникає в такому середовищі, між носіями заряду і поверхні заряду, індукованого на сферичній межі розподілу між двома середовищами з різною діелектричною проникненістю. Взаємодія $U(r,a)$ залежить від відносної діелектричної проникненості $\epsilon = \epsilon_1/\epsilon_2$; r – відстань носіїв заряду від центра наночастинки. Для носіїв заряду, рухомі поблизу верхніх шарів наночастинки, є дві можливості: 1) поляризація взаємодії призводить до залучення носіїв заряду на поверхні наночастинки (з $\epsilon < 1$ - до зовнішньої поверхні наночастинки і з $\epsilon > 1$ - до внутрішньої поверхні наночастинки) і, відповідно, у формуванні зовнішньої поверхні або внутрішніх станів поверхні; 2) з $\epsilon < 1$ при поляризації взаємодія призводить до відштовхування носіїв заряду від внутрішньої поверхні наночастинки і до появи локальних станів обсягу наночастинки.

У цих умовах, інтерфейс наночастинки може призвести до розмірно – квантованого спектра енергії квазічастинок нанопор у зв'язку з чисто просторовими обмеженнями області квантування і поляризаційної взаємодії носіїв заряду з поверхнею наночастинки. Оптичні властивості квазінульвимірної просторової структури в значній мірі визначається енергетичним спектром носіїв заряду, локалізованих електростатичними силами і зображується поблизу кордону розподілу між двома різними діелектричними середовищами.

Була оформлена макроскопічна теорія одного місцевого заряду частинки в квазінульвимірній структурі. Досліджували енергетичний спектр носіїв заряду в малих частинках (напівпровідників, діелектриків і металевих деталей), а

також досліджувалась залежність енергетичного спектру від розміру частинок, ефективної маси, заряду і відносної діелектричної проникності в умовах, коли поляризаційна взаємодія відіграє важливу роль. Передбачається новий тип локалізованого стану носіїв заряду усередині невеликої частинки, так звані поверхневі стани.

Хоча результати варіаційного розрахунку відносяться тільки до випадку $n=1$, але можна очікувати, однак, що для $n > 1$ спектру $E_{nl}(a)$ матиме аналогічний характер залежності радіуса a і l . Характер спектру $E_{nl}(a)$ в останньому випадку може бути досліджений варіаційним методом при довільних значеннях n і l , який може дати правильні результати для довільних значень n і l . Граничний перехід до точного кулонівського спектру, а також до спектру частинки, що рухається в кінцевій сферичній потенціальній ямі нескінченної глибини в області застосування цих спектрів при будь – якому n і l і може бути отримана з умов квантування за допомогою розв'язувань рівняння Шредінгера, в якому знаходять фазу в квазі – класичній хвильові функції, потенціал $U(r,a)$ має кулонівський вигляд:

$$n\omega(a) = E_g + E_{nl}(a) < E_g,$$

де E_g - енергія забороненої зони, а також явний вигляд радіальної хвильової функції «вільного» руху носіїв заряду, обмежене тільки допоміжними спінами.

Залежність спектру $E_{nl}(a)$ макроскопічних пов'язаних станів позитрона розташованих в обсязі сферичного радіуса a нанокристалів металів від радіуса порожнини n і орбітального числа l , де n і l квантове число довільних теоретичних досліджень (новий метод датчика). Найпростіший спосіб виявлення і вивчення розглянутих станів позитрона в невеликих наночастинках може бути дослідження поглинання світла між зонного переносу у зв'язаному стані. Слід визначити, що велике значення b_z (b_z в даному випадку середня відстань заряду локалізованого над плоскою поверхнею в основному стані), що характеризує розмірність стану ($\geq n^2 b_z$) забезпечує низьку чутливість до деталей інтерфейсу структури і невеликих відхилень від сферичної структури.

Під час дослідницької роботи досліджувались спектри люмінесценції аморфних і кристалічних тригліцеридних жирних кислот, які мають нанопори (НП) сферичної форми з середніми радіусами $a \cong 1 \text{ нм}$. Методом електронно – позитронної анігіляції було встановлено, що в НП середні радіуси яких знаходяться в інтервалі

$$0,3 \leq a \leq 0,5 \text{ нм} , \quad (1)$$

$$\bar{E}_B \cong -6,77 \text{ эв}$$

виникав воднеподібний атом позитронія з енергією зв'язку

Оскільки в справжній час відсутні теоретичні дослідження, які направлені на вивчення виникнення в НП таких наноструктур, то в даній роботі теоретично досліджується виникнення основного стану парапозитронія в НП тригліцеридів жирних кислот.

Методом анігіляції позитронів виявлено існування нанопор (НП) сферичної форми з радіусом $a \cong (15 - 20) \text{ нм}$, який близький до розмірів кристалічних металів Al, Cu, Mo, Pb, Fe и Ni в нанокристалічних металах. Виникнення позитронія в НП металів не було виявлено як теоретично, так і експериментальними дослідженнями. Тому дослідження, які направлені на розв'язання задачі про виникнення позитронія в НП металів, є досить актуальним.

В наступному підпункті даної роботи теоретично досліджується залежність енергії зв'язку позитронія від радіуса НП a в умовах, коли поляризаційна взаємодія позитронія з сферичною поверхнею розділа (НП – метал) грає суттєву роль. Запропоновано новий метод спектроскопічного визначення ступеня дисперсності нанокристалічних металів.

3 Енергія зв'язку позитрона в нанокристалічних металах

Розглянемо просту модель квазінульмірної наносистеми: нейтральну сферичну НП радіусом a з діелектричною проникненістю (ДП) $\epsilon_2 = 1$, яка оточена середовищем з ДП ϵ_1 (причому відносна ДП $\epsilon = (\epsilon_1/\epsilon_2) \approx 2$). В об'ємі НП рухався електрон e і позитрон p з ефективними масами m_e і m_p . Оскільки

$m_e = m_p = m_0$ (де m_0 - маса вільного електрона), то електрону і позитрону енергетично вигідно, рухаючись в об'ємі НП, знаходитись на одній прямій, яка проходить через центр НП, і на одній і тій же відстані $r_e = r_p = (\rho/2)$ від центра НП.

Запишемо гамільтоніан позитронія (його синглетний стан, в якому спіни 1s – електрона і 1s – позитрона антипаралельні), які рухаються в об'ємі НП радіусом a , в системі центра мас і в наближенні ефективної маси:

$$H(\xi, S) = -\frac{E_0}{4S^2} \cdot \frac{1}{\xi} \cdot \frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{d}{d\xi} \right) + V(\xi, S) \quad (2)$$

Тут перший член являється оператором кінетичної енергії позитронія, енергія кулонівської взаємодії електрона з позитроном $V(\xi, S)$ описується формулою:

$$V(\xi, S) = -\frac{E_0}{S} \cdot \frac{1}{\xi}. \quad (3)$$

де $\xi = (\rho/2a)$. В гамільтоніані (35) НП описується за допомогою моделі безкінечно глибокої потенціальної ями. Тут і надалі енергія вимірюється в одиницях:

$$E_0 = \frac{m_0 e^4}{4\hbar^2} \quad (4)$$

(де $E_0 = 6,803$ эВ являється енергією зв'язку позитронія у вакуумі) і вводиться безрозмірний радіус НП $S = (a/a_{ps})$ (де $a_{ps} = (2\hbar^2/m_0 e^2) = 1,06 \cdot 10^{-1}$ нм – борівський радіус позитронія у вакуумі). Мале значення параметра $\zeta = ((\epsilon - 1)/(\epsilon + 2)) \approx 0,1$ квазінульмірної наносистеми дозволяє в потенціальній енергії гамільтоніана (3) не брати до уваги енергію поляризаційної взаємодії електрона і позитрона з сферичною поверхнею НП – середовища вважаючи, що основний вклад в потенціальну енергію гамільтоніана (3) вносить енергія кулонівської взаємодії $V(\xi, S)$ (4) електрона з позитроном.

Визначимо енергію зв'язку основного синглетного стану позитронія в НП радіусом S варіаційним методом. Для цього знайдемо розв'язок радіального

рівняння Шредінгера з гамільтоніаном $H(\xi, S)$ (2) варіаційним методом. Варіаційну радіальну хвильову функцію основного стану позитронія в НП радіусом S задамо в такому вигляді:

$$\psi(\xi, S) = L(1 - \xi) \exp\left(-\frac{v(S)}{2}\xi\right) \quad (5)$$

де $v(S) = 2\beta(S) \cdot S$, а $\beta(S)$ - варіаційний параметр. Величина $L(\beta(S), S)$, яка визначається із умов нормування хвильової функції (38), приймає значення:

$$L(\beta(S), S) = \left(\frac{\beta(S)}{2a p_s}\right)^{\frac{3}{2}} \left[1 - \frac{6}{v(S)} + \frac{12}{v^2(S)} - \left(1 + \frac{6}{v(S)} + \frac{12}{v^2(S)} \right) \exp(-v(S)) \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (6)$$

Варіаційна хвильова функція (6) має в собі кулонівську хвильову функцію. Крім того, вона дорівнює нулю при $\xi = 1$, що відповідає існуванню на сферичній поверхні розподілу (НП – середовища) при $\xi = 1$ нескінченно високого потенціального бар'єру.

Для визначення варіаційним методом енергії зв'язку основного стану паразитронія $E(a)$ в НП радіусом a , середнє значення гамільтоніана (2) на хвильових функціях (6) запишемо так:

$$E(a, \beta(a)) = \langle \psi(\xi, a) | H(\xi, S) | \psi(\xi, a) \rangle \quad (7)$$

Розрахунок залежності енергії зв'язку $E(a)$ основного стану позитронія від радіуса a НП отримаємо шляхом мінімізації функціонала (40):

$$\frac{\partial E(a, \beta(a))}{\partial \beta(a)} = F(a, \beta(a)) = 0 \quad (8)$$

Не беручи до уваги вирази для функціонала (7), наведемо числовий розв'язок рівняння (8) у вигляді графіка залежності $\beta(a)$ (рис. 1).

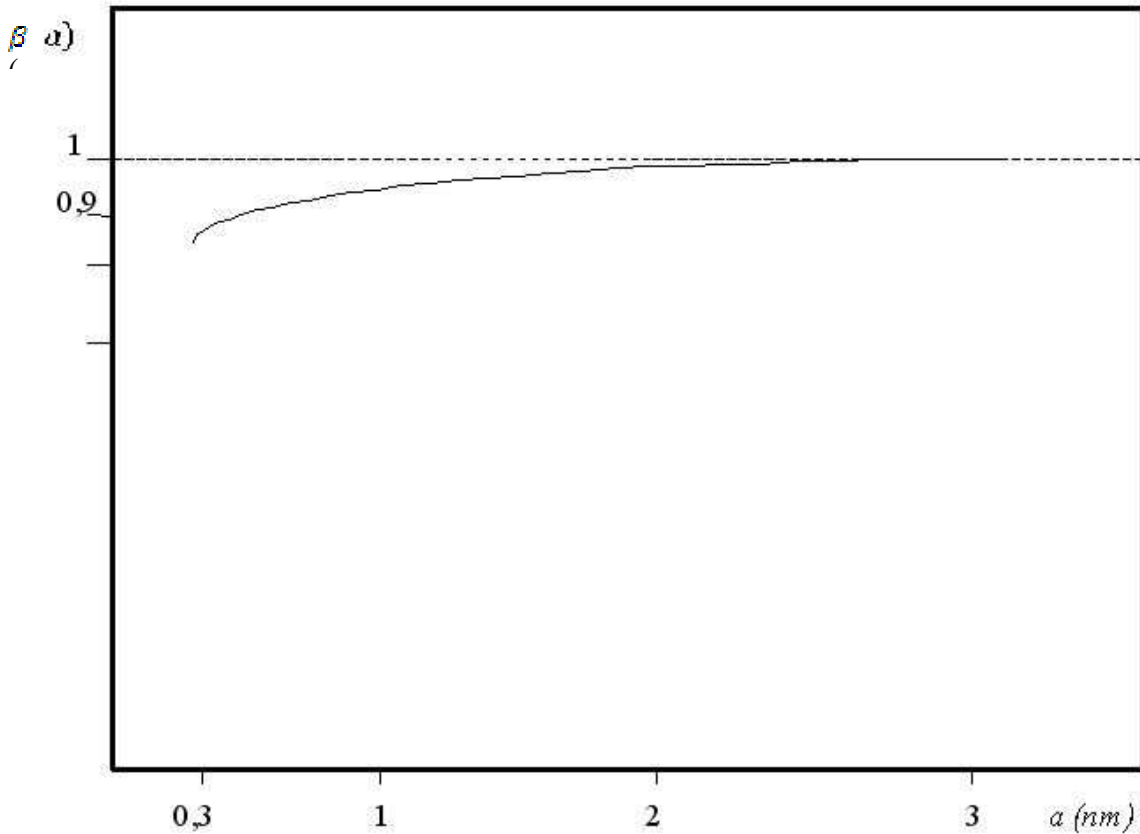


Рис. 1 залежність варіаційного параметра $\beta(a)$ від радіуса a нанопори (пунктир $\beta = 1$).

З рис. 3 випливає, що розв'язок цього рівняння являється функція $\beta(a)$, яка монотонно спадає в межах:

$$0,78 \leq \beta(a) \leq 0,98 \quad (9)$$

при змінні радіуса a НП в інтервалі :

$$0,3 \leq a \leq 3 \text{ нм} \quad (10)$$

Підставляючи значення варіаційного параметра $\beta(a)$ (42), який взято з графіка залежності $\beta(a)$ (див. рис. 3), одночасно з відповідними значеннями радіуса a НП з інтервалу (10) в функціонал (8), отримаємо енергію зв'язку позитронія $E(a)$, як функцію a радіуса НП (рис. 2).

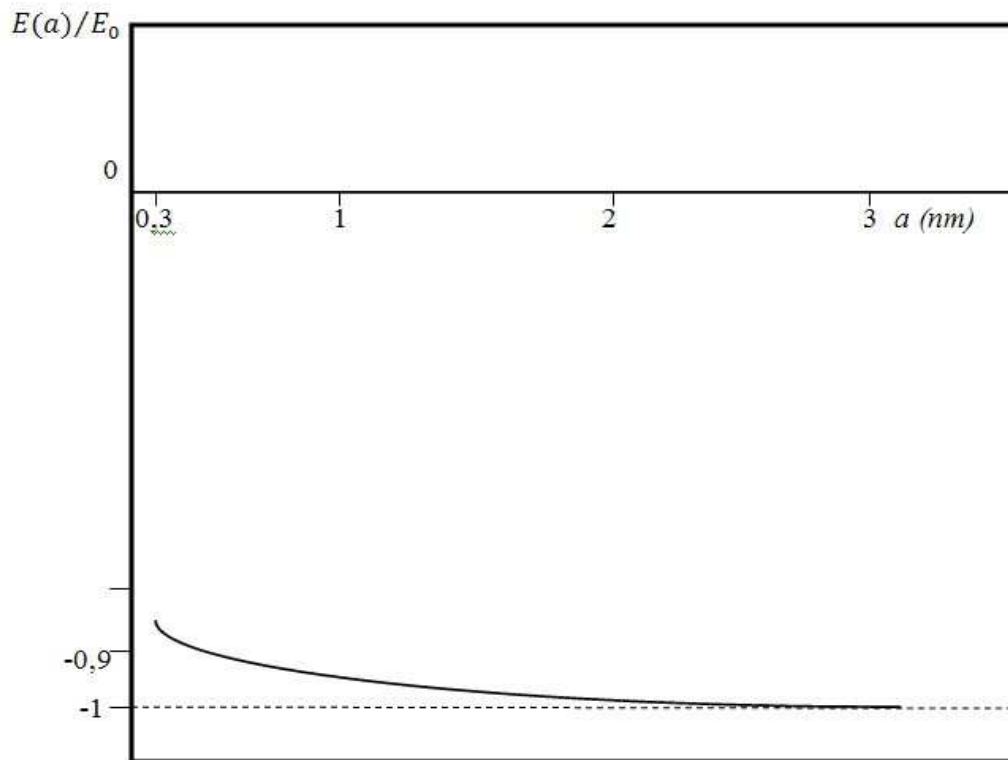


Рис. 2 Залежність енергії зв'язку позитронія від радіуса a нанопори (пунктир – значення енергії зв'язку позитронія $E_0 = 6,803$ **эв** у вакуумі).

Тепер розглянемо просту модель наносистеми: нейтральну сферичну НП радіусом a заповнену вакуумом з діелектричною проникненістю (ДП) $\epsilon_2 = 1$, яка оточена матрицею з ДП ϵ_1 . В об'ємі такої НП рухались електрон e і позитрон p з ефективними масами m_e і m_p , причому $m_e = m_p = m_0$, а наведена ефективна маса позитронія $\mu = (m_0/2)$ (де m_0 - маса електрона у вакуумі; r_e і r_p - відстань електрона і позитронія від центра НП (див. рис. 3).

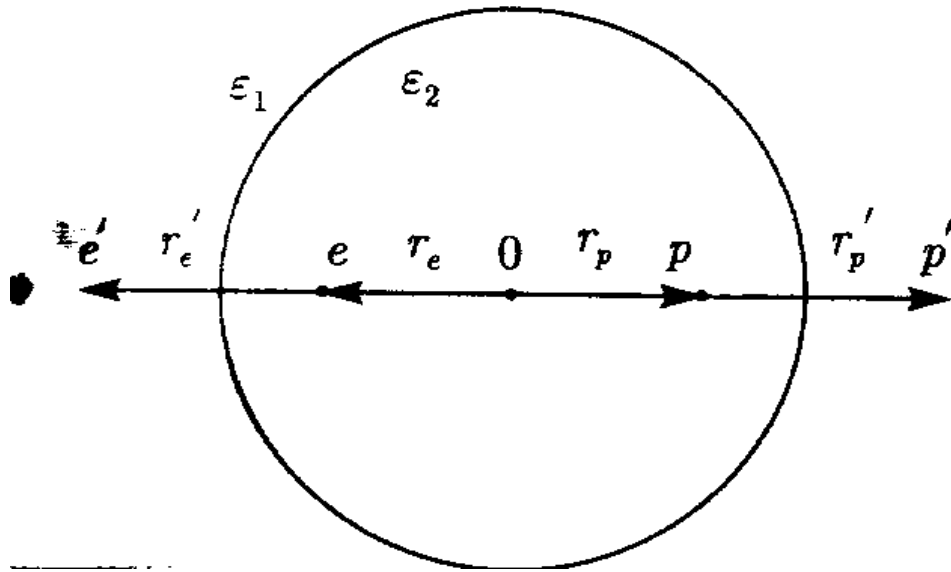


Рис. 3 Схематичне зображення позитронія в сферичній нанопорі. Радіус – вектори r_e і r_p визначається відстанню електрона e і позитрона p від центра (точки O) НП радіусом a . Заряди зображень $e' = -\left(\frac{a}{r_e}\right)e$ і $p' = -\left(\frac{a}{r_p}\right)p$ розташовані на відстанях $r_e' = \left(\frac{a^2}{r_e}\right)$ і $r_p' = \left(\frac{a^2}{r_p}\right)$ від центра НП і представляють собою точкові заряди зображення електрона і позитрона відповідно.

Оскільки $m_e = m_p = m_0$, то позитрону та електрону енергетично вигідно знаходитися на одній прямій, яка проходить через центр НП, і на одній і тій же відстані $r_e = r_p = \left(\frac{\rho}{2}\right)$ (див. рис.3).

Енергія зв'язку позитронія $E_{ep}(S)$, який рухається в НП радіусом S , є розв'язком радіального рівняння Шредінгера з гамільтоніаном:

$$H(\varphi, S) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{d}{d\rho} \right) \varphi + V_{ep}(\varphi) + V_{pe'}(\varphi, S), \quad (11)$$

який записано в наближенні ефективної маси в системі центра мас. В (11) перший член являється оператором кінетичної енергії позитронія, енергія кулонівської взаємодії між електроном і позитроном $V_{ep}(\varphi)$ описується формулою:

$$V_{ep}(p) = -\frac{e^2}{\rho} \quad (12)$$

Оскільки відносна ДП наносистеми $\varepsilon = (\varepsilon^2/\varepsilon_1) \ll 1$, то енергія взаємодії електрона $V_{ep}(\rho, S)$ і позитронія $V_{pe}(\rho, S)$ з «чужими» зображеннями, які виникають на сферичній поверхні розділу (НП – матриця), приймають вигляд [1]:

$$V_{ep}(\rho, S) = V_{pe}(\rho, S) = \frac{E_{ep}^0}{S} \frac{1}{(1 + \xi^2)} \quad (13)$$

де змінна $\xi = (\rho/(2a))$. В гамільтоніані (44) НП описується за допомогою моделі нескінченної глибокої потенціальної ями. Тут і надалі енергія

вимірюється в одиницях $E_{ep}^0 = Ry_{ep} = \left(\frac{m_0 e^4}{(4)\hbar^2} \right)$ (де E_{ep}^0 - енергія зв'язку позитронія у вакуумі) і використовується безрозмірна величина радіуса НП $S = (a/a_{1ep})$ ($a_{1ep} = (2\hbar^2)/(m_0 e^2)$) - боровський радіус позитронія у вакуумі.

В гамільтоніані позитронія (11) в НП радіусом a є енергія взаємодії електрона і позитронія з «чужими» зображеннями (12). Вираз, який описує енергії взаємодії (12), отримані в рамках макроскопічної електростатики. Тому можна використання енергії взаємодії (13) в гамільтоніані (11) може бути виправдана, якщо НП, які вивчаються мають макроскопічні розміри

$$a \geq 2 \text{ нм} . \quad (14)$$

Залежність $E_{ep}(S)$ можна легко проаналізувати для позитронієвих станів, радіус яких значно менше радіуса НП S . В цьому випадку в потенціальній енергії гамільтоніана (11), основну роль відіграє значення $\xi^2 \ll 1$. Тому, залишаючи в розкладі потенціальної енергії гамільтоніана (44) головні члени, отримаємо наступний вираз для енергії зв'язку позитронія:

$$E_{ep}^{(v)}(S) = - \left[\frac{1}{n^2} - \frac{2}{S} + \frac{n^2(5n^2 + 1)}{4S^3} \right] E_{ep}^0 \quad (15)$$

де $n=1,2,3,\dots$ - головне квантове число позитронія. Основний внесок в енергію зв'язку позитронія (14) дає енергія кулонівської взаємодії електрона з позитроном (13). Два члени, які залишаються в (13), які описують енергію взаємодії електрона і позитрона з «чужим» зображенням (14), що враховується в першому порядку теорію збудження і додають доданок до кулонівського спектру. Наступний розмір станів позитрона, який вивчається, є стан $n|p|n\rangle = (3/2)n^2 a_{ep}$, тому критерієм застосування їх існування є умова $n^2(5n^2 + 1)/8S^2 \ll 1$, які разом з вимогами на застосування першого порядку теорії збудження зводиться до такої умови:

$$(16)$$

Досліджуючи енергію зв'язку $E_{ep}^{(n)}(S)$ позитронія в НП радіусом S (15) методом ВКБ (Метод ВКБ (Венцеля – Крамерса – Бріллюена) – найвідоміший приклад квазікласичного розрахунку в квантовій механіці, в якому хвильова функція представлена як показникова функція, квазікласично розширена, а потім або амплітуда, або фаза повільно змінюється) для довільних значень n . Для того, щоб отримати з умови квантування граничний перехід до точного кулонівського спектру позитронія:

$$E_{ep}^{(n)}(S) = -\frac{E_{ep}^0}{n^2} \quad (17)$$

в області його застосування, необхідно для знаходження фази в квазікласичних хвильовій функції використати точний розв'язок рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (11) при $\rho \rightarrow 0$. При цьому потенціальна енергія електронно – променевої пари, яка входить в гамільтоніан (11), приймає кулонівський вигляд (12). В результаті отримуємо правило квантування:

$$S^{\frac{1}{2}} \int_{\xi_2}^{\xi_1} d\xi \left[-\left| \bar{E}_{ep}^{(n)}(S) \right| S + \left(\frac{1}{\xi} - \frac{2}{1 + \xi^2} \right) \right]^{\frac{1}{2}} = \pi n, \quad (18)$$

де $\xi_{1,2}$ - точки повороту, значення енергії $\left| \bar{E}_{ep}^{(n)}(S) \right| = \left| E_{ep}^{(n)}(S) / E_{ep}^0 \right|$.

Для довільного радіуса S НП значення енергії зв'язку $E_{ep}^{(n)}(S)$ позитронія може бути знайдено лише чисельно з формули (18) (інтеграл в (18) може бути виражен через табулювання еліптичного інтегралу).

Знайдені вирази (18) і (15) застосовні тільки для найнижчих позитронієвих станів (n), для яких виконується нерівність:

$$|\bar{E}_{ep}^{(n)}(S)| \ll \Delta V \quad (19)$$

де $\Delta V \approx 4,5$ эВ - енергія електронного стану на межі (метал – НП).

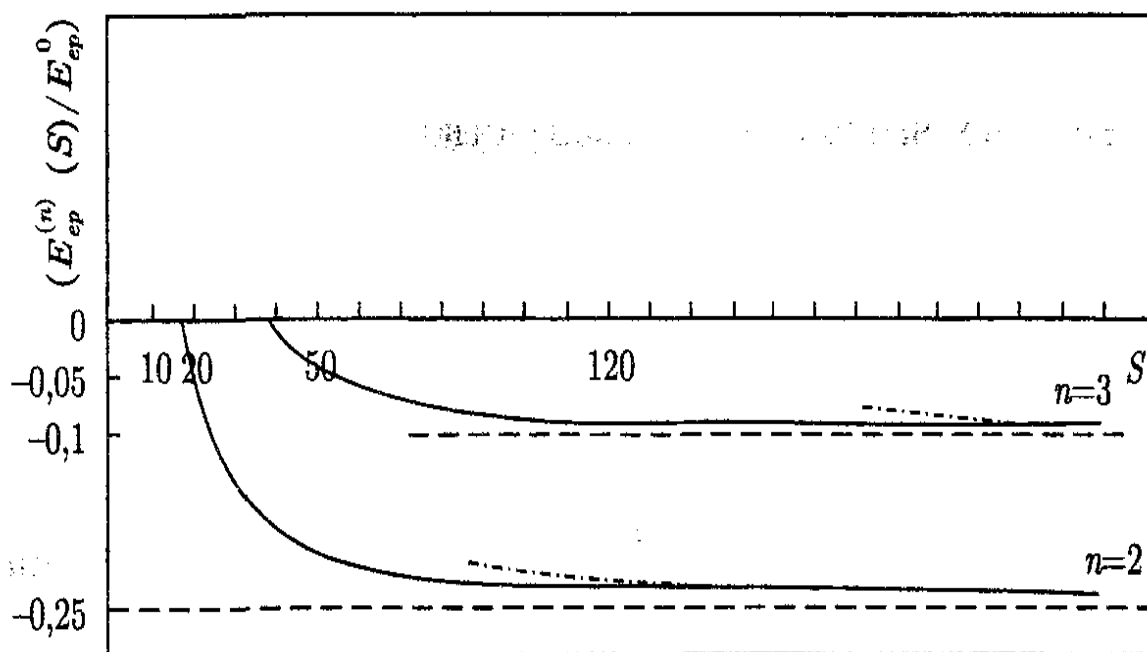


Рис. 5

Рис. 5 Енергія зв'язку $E_{ep}^{(n)}(S)$ електронно – позитронної пари як функції нанопори S (де $S = (a/a_{ep})$, a_{ep} – борівський радіус позитронія у вакуумі). Суцільні лінії $E_{ep}^{(n)}(S)$ – до наближення ВКБ, штрихпунктир $E_{ep}^{(n)}(S)$ в першому порядку теорії збудження, штрихові лінії – значення енергії зв'язку позитронія $E_{ep}^0 = 6,803$ эВ в вакуумі.

4. Порівняння теорії з експериментом

Виконання умови (19), (17) і (15) призводить до того, що в об'ємі НП буде існувати тільки скінченне число позитронієвих станів (n), починаючи зі стану ($n \geq 2$). Було досліджено тільки позитронієві стани ($n=2$) і ($n=3$). Розвинута нами теорія (виконуються умови (15), (17) і (19)) дозволяє проаналізувати позитронієві стани ($n=2$) і ($n=3$) в НП, починаючи з радіусів $a \geq 2$ нм.

З рис. 6 слідує, що пов'язані стани електронно – позитронної пари виникають в НП, починаючи зі значення критичного радіуса НП $a \geq a_c^{(2)} \approx 1,81$ нм (або $S \geq S_c^{(2)} \approx 17,1$ нм) для стану $n=3$ в НП, починаючи зі значення критичного радіуса НП $a \geq a_c^{(3)} \approx 4,1$ нм (або $S \geq S_c^{(3)} \approx 38,2$ нм). При цьому стан електронно – позитронної пари, починаючи з радіуса НП $a \geq a_c^{(2)}$ (для стану $n=2$), і починаючи з радіуса НП $a \geq a_c^{(3)}$ (для стану $n=3$), які знаходяться в області негативної енергії, що відповідає зв'язаному стану електрона і позитрона. В цьому випадку кулонівська взаємодія (12) між електроном і позитроном, а також енергія поляризаційної взаємодії (13) електрона і позитрона з сферичною поверхнею границі НП – метал переважають над енергією розмірного квантування електрона і позитрона в НП.

Енергія зв'язку позитронія $E_{ep}^{sp}(a)$ (14) в НП великого радіуса a (15), отримана з допомогою першого порядку теорії збудження, починаючи з НП радіусом $a \geq 8,9$ нм (або $S \geq 84$) (для стану з $n=2$) і починаючи з НП радіусом $a \geq 19,1$ нм (або $S \geq 180$) (для стану з $n=3$) приймає значення, яке незначно (в межах, які не перевищує 11%) відрізняється від енергії зв'язку, знайдена методом ВКБ (рис.5). З припостом радіуса a НП спостерігається зменшення енергії зв'язку $|E_{ep}^{sp}(a)|$ позитронія (рис. 5). Починаючи зі значення радіуса НП $\bar{a}_2 \approx 50,9$ нм (або $\bar{S}_2 \approx 480$) (для стану з $n=2$) і $\bar{a}_3 \approx 73,1$ нм (или $\bar{S}_3 \approx 690$) (для стану $n=3$) енергія зв'язку позитронія асимптотично наближається до значення (18), який характеризує позитронієві стани у вакуумі (рис. 5).

Значення енергії зв'язку $E_{eP}^{(n)}(a)$ позитронія лежить у видимій ($n=2$) і в інфрачервоній ($n=2$ и $n=3$) областях спектру.

Під об'ємним позитронієм в НП мають на увазі позитроній, структура якого (наведена ефективна маса, борівський радіус, енергія зв'язку) в НП не відрізняється від структури у вакуумі. Об'ємний позитроній виникає у стані ($n=2$) тільки в НП, починаючи з радіуса $a \geq a_2 \approx 50,9$ нм, і в стані ($n=3$) тільки в НП, починаючи з радіуса $a \geq a_3 \approx 73,1$ нм.

Слід відмітити, що виявлення особливостей позитронієвих станів, пов'язаних з залежністю їх енергії зв'язку $E_{eP}^{(n)}(a)$ від радіусів a НП і, зокрема, існування критичних радіусів НП $a_c^{(2)} \approx 1,81$ нм (для стану з $n=2$) і $a_c^{(3)} \approx 4,1$ нм (для стану з $n=3$), є цікавим для розробки нового матеріалу спектроскопічного контролю ступеня дискретності нанокристалічних металів, які можна застосовувати для контролю виникнення зародків нової фази (тобто НП) при радіаційних або теплових взаємодіях на нанокристалічних металах.

Значення функції $\beta(a)$ (9) і енергії зв'язку позитронія $E(a)$ (7) в НП, радіуса a які визначаються умовами (8), були отримані в умовах експериментів. З експериментів встановлено, що НП, які утримуються в твердій фазі тригліцеридів жирних кислот, радіуси a які змінюються в інтервалі (1), виникав

$$\bar{E}_v \cong -6,77 \text{ эВ}$$

воднеподібний атом позитронія з енергією зв'язку \bar{E}_v . Показано, що в тригліцеридах термодинамічно найбільш стабільні НП мали радіус $\bar{a} = 0,355$ нм.

Варіаційний розрахунок енергії зв'язку основного стану позитронія в НП

радіусом $\bar{a} = 0,355$ нм дає значення \bar{E}_v (див. рис. 3), яке незначно (в межах $\pm 0,01$ эВ) відрізняється від енергії зв'язку \bar{E}_v . Такі відмінності, можливо, виявлені не врахуванням в гамільтоніані (1) енергії поляризаційної взаємодії

електрона і позитрона з сферичною поверхнею розподілу (НП – середовище), а також тим, що варіаційний розрахунок може дати зниження значення енергії

зв'язку квазічастинок.

Слід відмітити, що отримана нами залежність $E(a)$ (8), яка описує енергію зв'язку позитронія в НП радіусом a , дозволить прослідкувати граничний перехід в НП великого радіуса (наприклад, при $a \approx 3$ нм) варіаційного параметру $\beta(a)$ до значення $\beta = 1$, а також енергії зв'язку $E(a)$ (8) до значення енергії зв'язку позитронія $E_0 = 6,803$ зВ у вакуумі (рис. 2 і 3).

Під об'ємним позитронієм НП мається на увазі позитроній, структура якого (приведена ефективна маса, борівський радіус, енергія зв'язку) в НП не відрізняється від структури позитронія у вакуумі. Таким чином, об'ємний позитроній виникає в основному стані тільки в НП з радіусом $a > a_c \approx 3$ нм (див. рис. 3).

В даному розділі показано, що отриманий варіаційний методом вираз $E(a)$ (8), яке описує енергію зв'язку основного стану позитронія, як функцію радіуса a НП, визначається перемовкою енергії кулонівської взаємодії електрона з позитроном $V(\xi, \zeta)$ (4), пов'язану з чисто просторовим обмеженням області квантування об'ємом НП. Знайдене при цьому значення енергії зв'язку позитронія $E(a = a)$ в НП радіусом $\bar{a} = 0,355$ нм слабо відрізняється від експериментального значення \bar{E}_0 . Встановлено, що виникнення основного стану об'ємного позитронія можливо лише в НП, радіус a якого перевищує значення деякого критичного радіуса $a_c \approx 3$ нм.

Цитована література

1. М.М. Нищенко, С.П. Лихторова, *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*, **1**, №1: 193 (2003).
2. H.E. Shaefer, *Nanostruct. Master.*, **6**, №518: 869 (1995).
3. С.И. Покутний, А.П. Шпак, В.Н. Уваров, М.С. Покутний, *Металофиз. Новейшие технол.*, **32**, №7: 859 (2010).
4. С.І. Покутній, *Укр. Фіз.. журн. Огляди*, **3**, №1: 46 (2006).
5. S. I. Pokutnyi, *Phys. Express*, **1**, №3: 158 (2011).
6. S. I. Pokutnyi, *Phys. Express*, **2**, №20: 1 (2012).
7. S.I. Pokutnyi, *J. Nanoscienc. Letters*, **1**, №3: 191 (2011).
8. А.Б. Мигдал. *Качественные методы в квантовой теории* (Москва: Наука: 1975).