



高等教育试用教材



正电子湮没谱学及其应用



滕敏康 主编
夏元复 主审



原子能出版社

高等教育试用教材

正电子湮没谱学及其应用

滕敏康 主编 夏元复 主审
沈德勤 编写

原子能出版社

北京

图书在版编目(CIP)数据

正电子湮没谱学及其应用/滕敏康主编. —北京:原子能出版社, 2000. 11

高等教育试用教材

ISBN 7-5022-2185-9

I. 正… II. 滕… III. 正电子-湮没-电子谱-高等教育-教材 IV. O572.32

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2000)第 48418 号

内 容 简 介

本书讲述了正电子湮没谱学的原理、特性、实验技术及其在材料科学、化学、生物学、医学、基础物理和表面物理中的应用。全书共分六章:第一、二章介绍正电子湮没的特性和基本原理;第三章介绍六种基本测量技术;第四章至第六章介绍在各学科中的应用。

本书原理描述简明扼要;实验技术介绍深入浅出;应用部分涉及面广,既有测量装置的简介,又有测量结果分析。

本书可作为高等院校原子核物理和核技术专业教材或教学参考书,也可供从事材料科学、生物学、化学及其它相关学科的科技人员参考。

☆ ☆ ☆

本书经核工业教材委员会核科学与工程类专业教材和教学指导委员会于 1997 年 5 月由夏元复主持召开的审稿会审定作为高等教育试用教材。

原子能出版社出版 发行

责任编辑:武玉妹 谭俊

社址:北京市海淀区阜成路 43 号 邮政编码:100037

原子能出版社印刷厂印刷 新华书店经销

开本:787×1092 mm 1/16 印张 10 字数 245 千字

2000 年 12 月北京第 1 版 2000 年 12 月北京第 1 次印刷

印数:1—800

定价:13.50 元

前 言

本书是根据中国核工业总公司核工业教材委员会于 1989 年召开的会议上审定的编写提纲编写的。本书适用于原子核物理和核技术专业的高年级本科生和研究生,作为教材或教学参考书,也可供从事材料科学、生物学、化学及其它相关学科的科技人员参考。

正电子湮没谱学及其应用领域的研究工作在近 30 多年来进展迅速,自 1965 年召开第一届国际正电子湮没会议至今,已召开了 11 次会议。在我国,1981 年召开第一届正电子湮没技术学术讨论会至今也已召开过 6 次会议了。目前从事本领域研究工作的人数越来越多;发表的论文和取得的成果日渐增加;应用的范围越来越广;在测量技术方面从正电子湮没寿命谱仪、一维角关联谱仪、多普勒展宽谱仪,发展到二维角关联谱仪、双参数测量谱仪、慢正电子束装置,而且仪器性能上多有改进和提高;在数据获取、处理和分析方面已日益完善。因此,很需要有一本能全面讲述本领域有关知识的教科书。

全书共分六章:第一、二章讲述正电子湮没谱学的基本原理,第三章介绍六种基本测量技术,第四章至第六章涉及正电子湮没技术在材料科学、化学、生物学、医学、基础物理、表面物理中的应用。全书力求简明扼要、深入浅出,应用部分涉及面广,既介绍测量装置又给出分析结果。为使没有学过“核物理实验方法”和“核电子学”的读者便于掌握必要的知识,本书第三章简要介绍了相关的内容。本课程需要讲授 54~72 学时。

本书编写大纲曾经唐孝威教授、夏元复教授、王蕴玉教授、王天民教授、彭郁卿教授等审阅。书稿由全国高校核科学与工程类专业教材与教学指导委员会组织召开的审稿会审定。参加审稿会的有夏元复教授、徐四大教授、赖启基教授,他们对本书提出许多宝贵意见,在此,编者谨向他们一并致谢。书中引用了清华大学、中国科技大学等文献资料、图表和数据,我们对这些资料的作者表示深忱的谢意。

全书第一、二、四章由沈德勋教授编写;第三、五、六章由滕敏康教授编写,并由他担任主编,进行了统稿;夏元复教授任主审。

由于我们水平有限,书中错误之处在所难免,敬请读者批评指正。

编 者
1997 年 5 月
于南京大学

目 录

第一章 正电子的性质及其湮没特性	1
第一节 正电子的基本性质	1
一、正电子存在的理论预言	1
二、正电子的发现	2
第二节 正电子的湮没特性	4
一、正电子在物质中的慢化和扩散	4
二、自由正电子湮没	5
三、正电子捕获湮没	8
四、正电子素湮没	13
第三节 正电子湮没 γ 辐射角度关联和湮没辐射多普勒能量展宽	15
一、湮没辐射角度关联	16
二、湮没辐射多普勒能量展宽	16
参考文献	18
第二章 正电子素及其应用	19
第一节 正电子素的形成	19
一、俄勒腺模型	19
二、激励模型	19
三、自由体积模型	20
四、气泡模型	21
五、小粒度粉末中正电子素的形成	21
六、慢正电子束的产生和固体表面正电子素的形成	21
第二节 正电子素的基本性质	22
第三节 正电子素的猝灭	24
一、转换猝灭	24
二、拾取猝灭	24
三、磁猝灭	24
四、化学猝灭	24
第四节 正电子素的检测	25
一、测量 3γ 与 2γ 产额之比 $Y_{3\gamma}/Y_{2\gamma}$	25
二、测量正电子的湮没寿命	25
三、测量湮没光子的能谱	25
四、测量湮没辐射角关联	26
参考文献	26
第三章 正电子湮没测量技术	27
第一节 基本测量技术	27
一、正电子源及其制备	27
二、样品的制备	29

三、 γ 射线探测器	29
四、电子仪器的单元特性	37
第二节 正电子湮没寿命测量	43
一、测量原理	44
二、正电子湮没寿命谱仪	44
三、谱仪参数选择和标定	46
四、寿命谱的数据分析	49
五、寿命测量中若干问题的探讨	64
第三节 正电子湮没辐射角关联测量	69
一、测量原理	69
二、一维角关联测量	69
三、二维角关联测量	73
第四节 正电子湮没辐射多普勒展宽谱测量	77
一、测量原理	77
二、多普勒展宽谱仪	78
三、多普勒展宽谱的数据分析	79
第五节 双参数测量技术	85
一、双参数测量技术的种类及其装置	85
二、参数的选择和分析	86
第六节 慢正电子束装置	88
一、正电子源	88
二、慢正电子的产生	89
三、慢正电子的传输	92
四、真空系统	94
五、靶室	94
六、慢正电子束技术的发展	94
参考文献	96

第四章 正电子湮没技术在材料科学中的应用	98
第一节 材料缺陷与正电子湮没	98
一、材料中缺陷的正电子捕获现象	98
二、正电子湮没寿命谱参数	98
三、动量密度参数	99
第二节 在金属和合金材料中的应用	100
一、金属和合金中电子动量分布和费密面形状的研究	100
二、在金属材料缺陷研究中的应用	101
第三节 在非金属材料微结构研究中的应用	109
一、在半导体材料中的应用	109
二、在聚合物材料中的应用	110
第四节 在离子键固体材料中的应用	112
一、实验方法	112
二、实验中存在的困难	113
三、碱卤晶体中缺陷研究的应用	113

参考文献	119
第五章 正电子湮没技术在化学、生物学和医学上的应用	121
第一节 在化学上的应用	121
一、正电子素反应动力学	121
二、在催化研究中的应用	124
第二节 在生物学和医学上的应用	128
一、在现代生物学研究中的应用	128
二、正电子发射断层照相(PET)	131
参考文献	135
第六章 慢正电子在基础物理和表面物理研究中的应用	136
第一节 基础物理研究	136
一、慢正电子与固体表面的相互作用	136
二、正电子与原子相互作用和正电子素原子物理	139
第二节 表面物理研究	143
一、慢正电子用于表面缺陷的研究	143
二、低能正电子衍射	147
参考文献	151

第一章 正电子的性质及其湮没特性

第一节 正电子的基本性质

一、正电子存在的理论预言

到 20 世纪 20 年代的末期,量子力学已经基本建立,用它来讨论微观粒子的低速运动是很有效的;另一方面,在 1905 年建立的狭义相对论,虽然能够讨论粒子的高速运动,但在处理微观粒子波粒二象性上却无能为力。因此,人们想把这两种理论结合起来。1928 年,英国青年物理学家狄拉克作出了成功的开端,他把量子力学的薛定谔方程推广到相对论领域,建立了一个“相对论性”的电子运动方程,这一方程以后被称为狄拉克方程^{[1][2]}

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar c}{i} (\alpha_1 \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x} + \alpha_2 \cdot \frac{\partial \psi}{\partial y} + \alpha_3 \cdot \frac{\partial \psi}{\partial z}) + \beta m_e c^2 \psi \quad (1.1)$$

式中, ψ 是四分量波函数, α 和 β 是常数。狄拉克方程成功解释了电子的自旋为 $\frac{1}{2}$, 自由电子的能量本征值 E 有以下的关系式

$$E^2 - c^2 p^2 + m_e^2 c^4 = 0 \quad (1.2)$$

由此得出

$$E = \pm \sqrt{c^2 p^2 + m_e^2 c^4} \quad (1.3)$$

这里, E 是电子的能量, p 是电子动量, m_e 是电子静止质量, c 是光速。其能级如图 1.1 所示。正能态从 $E = m_e c^2$ 到 $+\infty$ 构成连续谱;负能态从 $E = -m_e c^2$ 到 $-\infty$ 有相似的连续谱。正能态和负能态之间,从 $E = +m_e c^2$ 到 $-m_e c^2$ 没有能级。能态的正能量部分,对应于自由运动

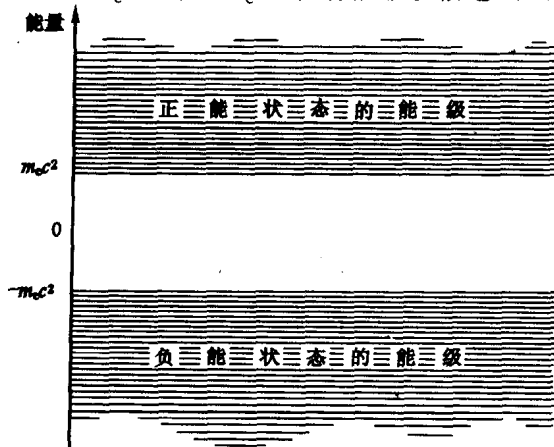


图 1.1 狄拉克方程允许存在的能级

电子,这在实验中早已被观察到。现在问题是:为什么实验中看不到那些处于“负能态”的电子呢?

狄拉克的理论许多结果都和实验相符合,但是它却遇到了一个特殊的“负能态困难”。按照狄拉克的理论,似乎允许存在电子的能量为负值的状态,而且负能级没有下限。这样一来,任何一个电子可以落入这个无底的负能深渊,从而无限地释放出能量。这一推论与实验事实显然不符。

为了回避这一明显的困难,狄拉克提出了一个假设:负能态事先已被大量电子所占满(它之所以能被占满,因为电子是费米子,它服从泡利不相容原理,每个能级只能填充自旋取向相反的二个电子,电子负能态的连续谱可以看作为由距离很近的无数能级组成)。狄拉克还假设这个填满了负能态电子海所造成的总体效果为零,即整个电子海的所有可观察量——电荷、质量、动量等都是零。换句话说,狄拉克所设想的负能态电子海就是我们平时所认为的真空。

全部填满的负能态电子海相当于真空,从这个电子海激发一个电子的时候,也就是说出现一个“空穴”的时候,相当于出现一个电子的反粒子,它带有正电荷,因此又称为正电子,记作 e^+ 。于是,狄拉克理论预言了有电子的反粒子(即正电子)的存在^[1],因为所有负能态能级已全部填满,上面所说的激发一个电子只能激发到正能态能级上去,这就是说,在出现一个正电子的同时还会出现一个普通电子(正能态电子),即电子对产生,见图 1.2。

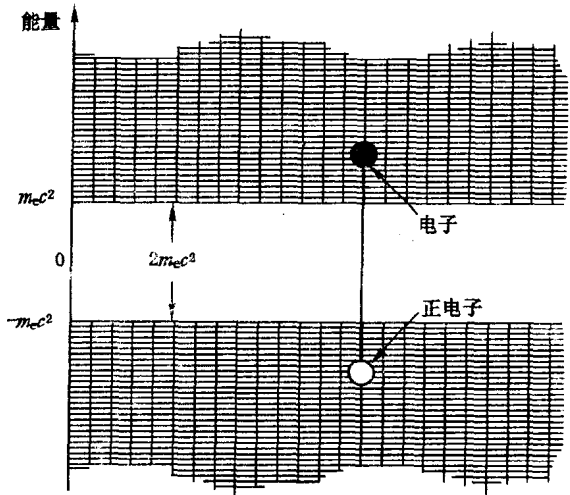


图 1.2 电子-正电子对的产生

在什么条件下,才能够实现狄拉克理论所预言的电子-正电子对呢? 根据图 1.2 正能态能级和负能态能级之间存在着 $2m_e c^2 = 1.02\text{MeV}$ 的间距。为了产生电子对,必须让真空吸收能量大于 1.02MeV 的光子,这样“负能电子海”中一个电子激发越过禁区,跳到正能态能级区,表现为一个正能量的电子 e^- 同时留下的电子“空穴”则表现为一个带正电荷的正电子 e^+ 。综合上述,发生了如下的过程

$$\gamma \xrightarrow{\text{原子核场中}} e^- + e^+ \quad (1.4)$$

反过来讲,如果电子海中有一个空位(即有一个正电子),那么正能态电子(即电子)就能够跳到这个空位上去,并放出能量和大于 1.02MeV 的光子。伴随着光子的产生,电子对消失了。这样的过程在物理上叫作“电子对湮灭”或称作正电子湮没。

二、正电子的发现

狄拉克的预言很快被实验所证实,1932 年,美国的安德逊(C. D. Anderson)^[3],在云室中拍到了宇宙线中正电子径迹的照片,见图 1.3。云室置于磁场中,磁场方向垂直画面向里;在云室中部加有一块 5mm 厚铅板(粒子穿过铅板要损失能量,从而径迹弯曲得更厉害),为的是判断粒子的出入方向。图 1.3 照片中的径迹向右弯曲,表明这是一个带正电的粒子;铅板下部的

径迹比上部弯曲得更显著,表明粒子由铅板上部射入,穿过铅板,粒子损失部分能量后,在云室下部留下了弯曲得更显著的径迹。根据径迹的长度、粗细、曲率半径和外加磁场的强度和方向,安德逊断定这是一种质量与电子相同但带正电荷的粒子,即是狄拉克所预言的正电子。

正电子的发现,引起了物理学家极大的兴趣。大量实验证明,次级宇宙射线中存在着正电子,还可以在有些核反应实验中找到正电子的痕迹。

实验发现,用能量高于 1.02MeV 的 γ 射线照射铅板、薄金属板,就有可能观察到正电子的出现。因为正电子总是和电子成对地产生,它们所带的电荷相反,所以在磁场中总是向不同的方向弯曲,电子-正电子对径迹的照片见图 1.4。电子-正电子对产生过程正是狄拉克理论所预言的。

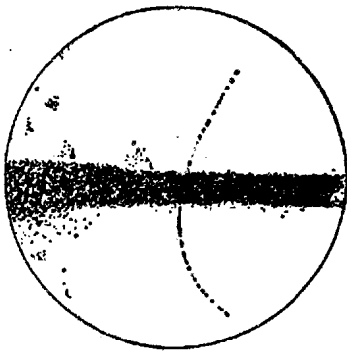


图 1.3 宇宙线通过铅板时所留下的径迹。
铅板放在云室内,云室则放在磁场中

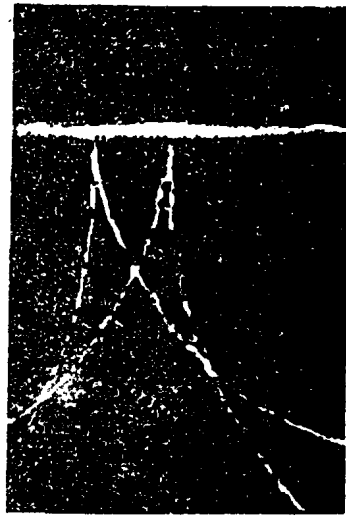


图 1.4 电子-正电子对产生(光子撞到铅原子核上而产生电子对)

一个高能光子在重原子核场附近转变为电子-正电子对,反过来,正负电子相遇,可以转变为二个 γ 光子,记作

$$e^+ + e^- \rightarrow 2\gamma \quad (1.5)$$

这叫作正负电子对的湮没过程,或简称正电子湮没。

电子和正电子是互为正反粒子的,电子 e^- 和正电子 e^+ 的静止质量都等于 $9.11 \times 10^{-28}\text{g}$ 。 e^- 是稳定的,即寿命为 ∞ , e^+ 也是一样。然而因为地球上的物质都包含大量电子,它一旦在过程($\gamma \rightarrow e^- + e^+$)出现后,在很短的时间内($< 10^{-8}\text{s}$),正电子与周围介质中的电子,通过湮没过程($e^+ + e^- \rightarrow 2\gamma$)而消失。正电子在物质中与电子相互作用时发生湮没,湮没过程的有关参数与物质结构有关。

在基本粒子物理学中,把正电子归类为“轻子”,在轻子族中有电子、正电子; $\mu^\pm$ 子和 $\tau^\pm$ 子以及六种相应中微子。正电子和电子的一些基本量见表 1.1。

表 1.1 正电子与电子的基本量

	正 电 子	电 子
静止质量	$9.11 \times 10^{-28} \text{g}$	$9.11 \times 10^{-28} \text{g}$
自 旋	1/2	1/2
电 荷	1	-1
轻子数	-1	1
磁 矩	1	-1

第二节 正电子的湮没特性

一、正电子在物质中的慢化和扩散

由放射性核素衰变放出的正电子具有较高的动能(通常在几百 keV 到几 MeV),进入介质后,通过与电子、原子或离子的非弹性碰撞损失能量,其动能降到热能水平,然后以热运动速度扩散。

1. 热化

具有几百 keV 的高能正电子(如 ^{22}Na 放射源的正电子最大动能为 545keV),只需经过几个 ps($1\text{ps}=10^{-12}\text{s}$)时间,能量降到热能水平(kT 量级, k 是玻耳兹曼常数, T 是绝对温度,在 300K 时,正电子的动能约为 0.025eV),然后再以热运动的速度扩散。正电子的动能损失主要发生在热化过程中,因此正电子在介质中的射程将主要由热化阶段决定。

2. 扩散湮没

热化后的正电子在材料中扩散,在扩散过程中与材料中的电子发生湮没,产生 γ 光子,由它将材料中的信息带出来。这一扩散湮没过程的持续时间因材料不同而不同,在固体中的时间范围是 100~10000ps。严格地说,正电子寿命就是指这一段时间,实际上,这段时间是难以确定的。我们把正电子发射时刻(如 ^{22}Na 源与正电子同时发射的 1.28MeV γ 光子时刻)作为起始信号,到发出 0.511MeV 湮没光子时刻作为终止信号,这一时间间隔作为正电子寿命。热化后,正电子动能仅 0.025eV,扩散距离很短,因此扩散距离并不影响正电子的射程。

在材料中,正电子与电子湮没可以有以下几种方式:正电子处于自由状态与电子湮没,这种过程称正电子自由态湮没;正电子被材料中缺陷捕获,处于缺陷捕获状态下与电子湮没,则这种湮没称为捕获态湮没;正电子从材料中捕获一个电子形成相对稳定的束缚态,称正电子素(它类似于氢原子,称 Positronium,简写为 Ps),这种湮没过程称正电子束缚态湮没或称正电子素湮没。研究正电子的各种湮没特性是研究材料微观结构的一种有效方法。

在金属材料中,通常正电子不会形成正电子素,正电子湮没方式主要是自由态湮没和捕获态湮没,通常为一个自由态湮没和多个捕获态湮没的多种湮没方式。在分子材料中会形成正电子素,因此除了自由态湮没、捕获态湮没外,还存在正电子素湮没。正电子湮没主要发生在其射程的末端,所以正电子湮没反映的信息是正电子射程末端处材料的微观结构信息,Paulin 给出正电子在材料中射程的经验公式

$$\frac{1}{R_+} = \frac{17\rho}{E^{1.43}} \quad (1.6)$$

其中, ρ 为材料密度, 单位是 gcm^{-3} ; E 是正电子初始动能, 单位是 MeV; R_+ 是射程, 单位是 cm。式(1.5)得出的只是正电子射程的估算值, 实际射程与此估算值是有差异的。射程除同正电子能量 E , 材料密度 ρ 有关外, 还与材料的原子序数 Z 有关, 对于 ^{22}Na 正电子源, Paulin 给出修正后的射程经验公式

$$\frac{1}{R_+} = \frac{2.8 \cdot \rho \cdot Z^{0.15}}{\bar{E}^{1.19}} \quad (1.7)$$

其中, $\bar{E}$ 是 ^{22}Na 源理论计算得到的正电子平均动能, 对于 ^{22}Na 源 $\bar{E} = 0.15\text{MeV}$ 。用式(1.5)和式(1.6)计算得到一些材料的正电子射程 R_+^a, R_+^b , 见表 1.2。

由表 1.2 中可以看出, 正电子材料中的射程通常为 $20 \sim 300\mu\text{m}$ 。为了保证正电子湮没所反映的是射程末端材料结构信息, 因此样品必须足够厚, 以保证正电子不会穿透样品, 通常, 试样的厚度取经验公式计算射程的 3~5 倍, 即约 $50 \sim 1500\mu\text{m}$, 依材料不同而异。

表 1.2 ^{22}Na 源的正电子在材料中的射程(R_+^a 用式(1.5)计算, R_+^b 用式(1.6)计算)

材 料	$\rho(\text{gcm}^{-3})$	Z	$R_+ (\mu\text{m})$	
			R_+^a	R_+^b
聚乙烯	0.90		274	
Na	0.97	11	255	268.8
聚苯乙烯	1.06		233	
尼龙	1.11		222	
Mg	1.74	12	142	148.3
NaCl	2.16		114	
石墨	2.25	6	110	126.9
Si	2.42	14	102	103.9
Al	2.70	13	91.5	94.2
硬铝	2.79		88.5	
金刚石	3.52	6	70.2	81.1
Ge	5.46	32	45.2	40.8
Zn	6.92	30	35.7	32.4
Cr	7.14	24	34.6	32.6
Mn	7.30	25	33.8	31.6
Sm	~7.75	62	31.9	26.0
Fe	7.86	26	31.4	29.2
不锈钢 18-8	7.91		31.2	
黄铜	~8.6		28.7	
Co	8.71	27	28.4	26.2
Ni	8.80	28	28.1	25.8
Cu	8.93	29	27.7	25.3
Mo	9.01	42	27.4	23.7
Pb	11.3	82	21.9	17.1
W	19.3	74	12.8	10.2

二、自由正电子湮没

1. 正电子湮没过程

正电子湮没过程是一个量子电动力学过程, 它的理论处理要用到量子场论, 这超过了本书

的范围,因此我们只在这里列出若干主要的理论结果。正电子与电子湮没时,主要有三种途径,分别产生一个光子、二个光子或三个光子。发射更多光子或不发射光子过程发生概率很小,可以不予考虑。发射单个光子时,要求有第三者(原子核或原子的内层电子)参加,吸收反冲动量,由于这一条件存在,使发射单 γ 湮没概率减少,这个减弱因子在数量级上约等于 α^2 ($\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$,称为精细结构

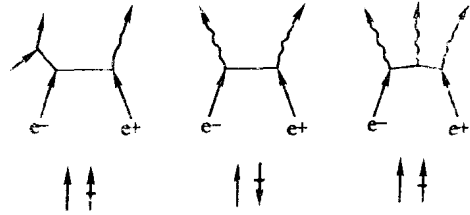


图 1.5 单光子、双光子和三光子湮没的费曼图
与 e^+ , e^- 自旋的取向

常数)。发生双 γ 湮没的概率最大,若正负电子对动能很小,由于动量守恒和能量守恒的要求,湮没产生的两个 γ 光子沿相反方向发射,每个光子的能量为 0.511MeV (即 $m_e c^2 = 0.511\text{MeV}$)。发生三 γ 湮没时,三个光子的总能量为 1.02MeV ,三个光子在一个平面上,各个光子的总能量按它们的相对发射方向分配。图 1.5 是这三种过程的费曼图(Feynman Diagram)。

从图 1.5 可以看出双 γ 湮没有两个顶点,单 γ 和三 γ 则都有三个顶点,在费曼图上,增加一个相互作用的顶点,则相应于该过程反应截面要乘一个精细结构常数 α ,因而,发生单 γ 湮没概率 σ_γ ,和三 γ 湮没概率 $\sigma_{3\gamma}$ 比双 γ 湮没概率 $\sigma_{2\gamma}$ 要小得多。

σ_γ 、 $\sigma_{2\gamma}$ 、 $\sigma_{3\gamma}$ 有以下关系

$$\frac{\sigma_{3\gamma}}{\sigma_{2\gamma}} \approx \alpha; \quad \frac{\sigma_\gamma}{\sigma_{2\gamma}} \approx \alpha \cdot \alpha^3 = \alpha^4 \quad (1.8)$$

这就是说,主要湮没过程是双 γ 湮没,单 γ 湮没概率极小,本书主要篇幅都是讨论双 γ 湮没,在个别章节中涉及到三 γ 湮没。

2. 正电子双光子湮没截面和湮没率。

电子与正电子的相对速度远小于光速时,狄拉克^[1]计算了产生双光子湮没的截面 σ 为

$$\sigma = \pi r_0^2 c/v \quad (1.9)$$

式中, r_0 是电子经典半径, c 是光速, v 是正电子相对于电子的速度。

正电子的湮没率取决于 σ 和湮没区域中电子的密度,即

$$\lambda = \sigma_0 \cdot n_e \cdot v = \pi r_0^2 n_e c \quad (1.10)$$

式中, n_e 为单位体积(cm^3)中的电子数。对于原子序数为 Z ,质量数为 A ,密度为 ρ 的材料,单位体积的原子数为

$$\frac{6.02 \times 10^{23}}{A} \cdot \rho$$

单位体积的电子数 n_e 为

$$n_e = \frac{6.02 \cdot 10^{23}}{A} \cdot \rho Z \quad (1.11)$$

于是正电子湮没率

$$\begin{aligned} \lambda &= \pi(2.8 \times 10^{-13})^2 \times 6.02 \times 10^{23} \times 3 \times 10^{10} \rho Z/A \\ &= 4.5 \times 10^9 \rho Z/A \end{aligned} \quad (1.12)$$

由式(1.12)可知,湮没率与正电子速度无关,与电子密度成正比,电子密度愈大,湮没率愈大。因此,正电子寿命 $\tau(\tau=1/\lambda)$ 就愈短。所以,测量正电子的寿命,可以得到正电子所处材料中电子密度的信息。在凝聚态材料中,自由正电子寿命通常在 $1 \times 10^{-9} \text{s} \sim 5 \times 10^{-9} \text{s}$ 范围内。

由于电子和正电子之间的库仑吸引、原子核对正电子的排斥和其它外场的作用,正电子所处的材料中电子密度的计算很困难。在金属中,正电子自由湮没率可以按照索末菲(Sommerfeld)理论给出。

根据索末菲理论,金属性质主要决定于传导电子,传导电子可以看作有相互作用的气体,这种自由电子气体的性质与电子密度参数 r_s 有关, r_s (单电子球半径)是这样定义的,单电子球是指金属中单个传导电子平均占有的球体积,其半径是 r_s ,以波尔半径 a_0 为单位,这样有

$$\frac{4}{3}\pi(r_s a_0)^3 = \frac{1}{n_e} \quad (1.13)$$

式中, n_e 是自由电子的体积密度。在完整纯金属中,热化后的正电子可以看作是自由正电子。它与自由电子湮没时同样遵从自由电子湮没率公式,将式(1.13)代入狄拉克公式(1.10)得索末菲湮没率 λ_s 为

$$\begin{aligned} \lambda_s &= \pi v_0^2 n_e c \\ &= \pi(\alpha^2 a_0)^2 n_e c \\ &= \pi(\alpha^2 a_0)^2 \frac{3c}{4\pi(r_s a_0)^3} \\ &= \frac{3\alpha^4 c}{4a_0} \cdot \frac{1}{r_s^3} \end{aligned}$$

代入 α, a_0 值后

$$\lambda_s \approx \frac{12}{r_s^3} \quad (\text{ns})^{-1} \quad (1.14)$$

注意式中用到的电子经典半径 $r_0 = \alpha^2 a_0$, α 是精细结构常数。用式(1.12)计算得到的正电子湮没率与实验值符合很差,计算值比实验值小很多。这表明,用相互作用的电子气体模型来描述金属中正电子湮没过程并不合适。由于正负电子间的库仑引力,正电子在自由电子气体中不大会是“裸的”,在正电子周围必然存在一层稠密的屏蔽电子云,因此,正电子所在处的电子密度要比金属中平均电子密度大,于是实际的湮没率要比较平均电子密度计算出来的值大。也就是说,由于屏蔽电子云效应,湮没率增强了,这称为“增强效应”,可以用增强因子 K 来描述这一效应,即增强后的湮没率 $\lambda = K\lambda_0$ 。

布兰特(Brandt)^[4]用内插法得到一个与实验结果较为符合的湮没率 λ_B

$$\lambda_B = \frac{12}{r_s^3} \left(1 + \frac{r_s^3 + 10}{6}\right) \quad (\text{ns}^{-1}) \quad (1.15)$$

因为一般金属的 r_s 值为 $2 \sim 6$,由式(1.15)可知,增强因子 K 约 $4 \sim 40$ 。在计算金属中正电子寿命时,增强效应是必须考虑的。由式(1.15)计算得到的布兰特湮没率 λ_B 列于表 1.3 和图 1.6。可以看出,对于 Cu、Ag、Au 等, λ_B 与实验值符合较差,这是因为这些金属 d 壳层电子在湮没中贡献较大,使实验值高于布兰特估算的湮没率。在大多数情况下,式(1.15)与实验结果

符合还是比较好的。

表 1.3 部分金属中的正电子湮没率

金属	$r_s(a_0)$	$\lambda_S(ns^{-1})$	$\lambda_E(ns^{-1})$	$\lambda_B(ns^{-1})$
Al	2.07	1.35	6.13	5.61
Fe	2.12	1.26	8.55	5.36
Sn	2.22	1.10	4.72	4.92
Cd	2.59	0.69	3.86	3.84
Cu	2.67	0.63	8.20	3.68
Mg	2.66	0.64	4.31	3.70
Au	3.01	0.44	7.19	3.17
Ag	3.02	0.44	7.04	3.16
Li	3.30	0.33	3.33	2.89
Na	4.00	0.19	2.94	2.50
K	4.90	0.10	2.51	2.27
Rb	5.20	0.09	2.43	2.23
Cs	5.65	0.07	3.39	2.18

注： λ_S ——索末菲湮没率； λ_B ——布兰特湮没率； λ_E ——实验值。

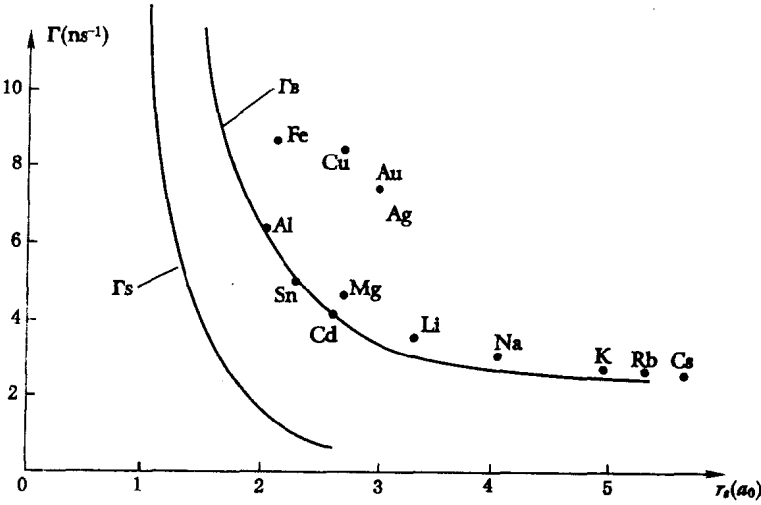


图 1.6 金属中正电子湮没率，圆点为实验值， Γ_S 和 Γ_B 分别为按索末菲理论和布兰特理论的 λ_S 和 λ_B 的计算值

三、正电子捕获湮没

1. 正电子捕获效应

正电子在完整晶体中热化、扩散，与电子相碰撞发生正负电子湮没称自由态湮没，一旦晶

体中出现缺陷(如空位、位错、微空洞)等,情况将会发生变化。如在完整的原子点阵中出现一个正电荷空位,这种空位相应带有等效负电荷,而正电子带正电,在空位处,正电子势能更低,正电子容易被空位缺陷处捕获,尔后再湮没,这就是正电子的捕获态湮没。由于空位处电子密度较低,正电子空位捕获态湮没的寿命将变长。

设晶体原子点阵完整, E_c 是正电子基态能量,若晶体点阵有一个原子空缺,它是正电荷空位,正电子在这里势能曲线降低 E_c ,它与势能曲线的最低处的差 V_i 称为空位对正电子捕获势。正电子被缺陷捕获后,正电子捕获态能级能量为 E_0 ,自由态正电子基态能级 E_c 与捕获态能级能量 E_0 的差值 $\Delta E = E_c - E_0$ 称之为正电子捕获能。显然, ΔE 值将会影响到正电子的逃逸。一般说来,捕获势越大则捕获能也会越大,但二者并不完全等同。

在空位缺陷处,正电子捕获和正电子逃逸都可能发生,这是两个相反的过程,在大多数情况下,由于正电子湮没率较大,寿命很短,正电子从缺陷处逃逸概率都很小,可以忽略不计。

应该指出,并不是所有纯金属的空位都能捕获正电子,有不少金属材料就未能观察到正电子捕获效应。金属材料空位能否捕获正电子取决于该金属电负性值的大小。在电负性较小的金属中,正电子能够有较多的电子围绕在其周围,从整体来看,正电子被一团电子紧紧包住呈电中性或电负性,这样空位就不能捕获正电子;在电负性较大的金属中,正电子常以“裸”正电子形式存在,就易于被这种金属空位捕获。

空位捕获效应提供了大量材料微观结构信息,正电子捕获态湮没是研究材料微观结构的有效实验方法。

2. 二态捕获模型

热化正电子与材料缺陷的相互作用可以用捕获模型比较成功地加以描述。这一模型是由 Brandt^[4] 首先提出的,它是以求解一套联立速率方程为基础。

捕获模型假定正电子在样品中除了自由态之外还可处于若干个缺陷捕获态和正电子束缚态。设在任一时刻 t , 处于自由态或其它非自由态的正电子数目分别为 n_f 和 n_i ($i = 1, 2, 3 \dots$) 则下面的方程成立

$$\begin{cases} \frac{dn_f}{dt} = -\lambda_f n_f(t) - \sum_i K_i n_f(t) + \sum_i \bar{K}_i n_i(t) \\ \frac{dn_i}{dt} = -\lambda_i n_i(t) + \sum_i K_i n_f(t) - \sum_i \bar{K}_i n_i(t) \end{cases} \quad (1.16)$$

($i = 1, 2, 3 \dots$)

$$\text{初始条件, } t = 0 \text{ 时, } n_f(0) = n_0, n_i(0) = 0 \quad (1.17)$$

式中, λ_f 和 λ_i 分别为正电子处于自由态和第 i 个捕获态时的湮没率,它们的倒数分别为正电子处于这两种态时的寿命 τ_f ($\tau_f = 1/\lambda_f$) 和 τ_i ($\tau_i = 1/\lambda_i$),通常 $\tau_f < \tau_i$ 。 K 是缺陷对正电子的捕获率, $\bar{K}$ 是正电子从捕获态变成自由态的逃逸率。

二态捕获模型是假定正电子在样品中除自由态湮没外,只有一种缺陷捕获态($i = 1$)。在任一时刻 t , 处于自由态的正电子数为 n_f , 处于捕获态的正电子数为 n_d , 则式(1.16)和式(1.17)可写为以下形式,

$$\begin{cases} \frac{dn_f(t)}{dt} = -\lambda_f n_f(t) - K n_f(t) + \bar{K} n_d(t) \\ \frac{dn_d(t)}{dt} = -\lambda_d n_d(t) - K n_d(t) + K n_f(t) \end{cases} \quad (1.18)$$

正电子热化过程很快,通常只要几个 ps,一般假定在此时间内,正电子不发生湮没,全部 n_0 个正电子都处于自由态,其它态上的正电子数为零,于是式(1.17)初始条件可以写为

$$\begin{cases} n_f(0) = n_0 \\ n_d(0) = 0 \\ \left. \frac{dn_f}{dt} \right|_{t=0} = -(\lambda_f + K) n_0 \\ \left. \frac{dn_d}{dt} \right|_{t=0} = K n_0 \end{cases} \quad (1.19)$$

则可得方程(1.18)的解

$$\begin{cases} n_f(t) = \frac{\lambda_f + K - \Gamma_2}{\Gamma_1 - \Gamma_2} n_0 e^{-\Gamma_1 t} + \frac{\Gamma_1 - (\lambda_f + K)}{\Gamma_1 - \Gamma_2} n_0 e^{-\Gamma_2 t} \\ n_d(t) = -\frac{K}{\Gamma_1 - \Gamma_2} n_0 e^{-\Gamma_1 t} + \frac{K}{\Gamma_1 - \Gamma_2} n_0 e^{-\Gamma_2 t} \end{cases} \quad (1.20)$$

式中,

$$\Gamma_1 = \frac{1}{2} [\lambda_f + K + \lambda_d + \bar{K} + \sqrt{[(\lambda_f + K) - (\lambda_d + \bar{K})]^2 + 4K\bar{K}}] \quad (1.21)$$

$$\Gamma_2 = \frac{1}{2} [\lambda_f + K + \lambda_d + \bar{K} - \sqrt{[(\lambda_f + K) - (\lambda_d + \bar{K})]^2 + 4K\bar{K}}] \quad (1.22)$$

式(1.21)和式(1.22)还是很复杂,为了能得到更简单关系式,假定缺陷只捕获正电子,捕获了的正电子就在捕获态上湮没,正电子不会再逃逸变成自由光电子,对于大多数金属样品,正电子缺陷捕获能较大,有几个 eV。这假设能成立,因此,有 $\bar{K} = 0$ 。

由此,得到简单的二态捕获模型的结果

$$\begin{cases} n_f(t) = n_0 e^{-\Gamma_1 t} \\ n_d(t) = n_0 \frac{K}{\Gamma_1 - \Gamma_2} (e^{-\Gamma_2 t} - e^{-\Gamma_1 t}) \end{cases} \quad (1.23)$$

式中

$$\Gamma_1 = \lambda_f + K \quad (1.24)$$

$$\Gamma_2 = \lambda_d \quad (1.25)$$

从实验测得的正电子寿命谱 $S(t)$ 是 t 时刻湮没的(自由态湮没 + 捕获态湮没)正电子数之和,令 $n_0 = 1$, 即

$$\begin{aligned} S(t) &= \lambda_f n_f + \lambda_d n_d \\ &= \frac{\lambda_f - \lambda_d}{\Gamma_1 - \lambda_d} e^{-\Gamma_1 t} + \frac{K}{\lambda_f + K - \lambda_d} e^{-\lambda_d t} \\ &= I_1 e^{-\Gamma_1 t} + I_2 \cdot e^{-\lambda_d t} \\ &= I_1 e^{-\lambda_1 t} + I_2 \cdot e^{-\lambda_2 t} \end{aligned} \quad (1.26)$$

从式(1.26)可以看出,实验测得的谱可以看作两个独立的寿命谱的叠加,湮没率各为 λ_1