

Академик НАН Украины А. П. Шпак, С. И. Покутний, В. Н. Уваров,
М. С. Покутний

Энергия связи электронно-позитронной пары в нанопорах триглицеридов

Теоретично досліджується залежність енергії зв'язку електронно-позитронної пари від радіуса нанопори, що міститься в триглицеридах. Встановлено пороговий характер виникнення основного стану об'ємного парапозитронію у нанопорі та визначено значення критичного радіуса нанопори, починаючи з якої у нанопорі може утворитися об'ємний парапозитроній.

1. В работе [1] установлено, что вид спектра люминесценции аморфных и кристаллических триглицеридов жирных кислот зависит от радиуса a нанопор (НП), содержащихся в таких триглицеридах. При этом радиусы НП находились в интервале $0,3 \text{ нм} \leq a \leq 0,6 \text{ нм}$. Область спектра люминесценции таких наносистем варьировалась от видимой до ближней ультрафиолетовой. Последнее обстоятельство может быть использовано при производстве дисплеев [2]. Методом электронно-позитронной аннигиляции в [1] было выявлено, что в НП, содержащихся в твердой фазе триглицеридов жирных кислот, радиусы которых находились в интервале $0,3 \text{ нм} \leq a \leq 0,5 \text{ нм}$, возникал водородоподобный атом позитрония с энергией связи $E_{p_s} = -6,77 \text{ эВ}$.

В настоящее время отсутствуют теоретические исследования, в которых изучалось бы возникновение позитрония и его структура в НП триглицеридов жирных кислот. Поэтому теоретические исследования, направленные на решение такой проблемы, весьма актуальны.

В данной работе приведены результаты вариационного расчета энергии связи основного состояния электронно-позитронной пары $E(a)$ как функции радиуса a НП, содержащихся в триглицеридах жирных кислот. Установлено, что возникновение основного состояния объемного парапозитрония носит пороговый характер и возможно лишь в НП, радиус которой a превышает значение некоторого критического радиуса $a_c \approx 3 \text{ нм}$.

2. Рассмотрим простую модель квазинульмерной системы: нейтральную сферическую НП радиусом a с диэлектрической проницаемостью (ДП) $\varepsilon_2 = 1$, окруженную средой с ДП ε_1 (причем относительная ДП $\varepsilon = (\varepsilon_1/\varepsilon_2) \approx 2$). В объеме НП двигались электрон e и позитрон p с эффективными массами m_e и m_p соответственно. Поскольку $m_e = m_p = m_0$ (где m_0 — масса свободного электрона), то электрону и позитрону энергетически выгодно, двигаясь в объеме НП, находиться на одной прямой, проходящей через центр НП, и на одном и том же расстоянии $r_e = r_p = (\rho/2)$ от центра НП.

Запишем гамильтониан электронно-позитронной пары (ее синглетного состояния, в котором спины 1s-электрона и 1s-позитрона антипараллельны), движущейся в объеме НП радиусом a , в системе центра масс и в приближении эффективной массы:

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

Здесь первый член является оператором кинетической энергии электронно-позитронной пары; энергия кулоновского взаимодействия электрона с позитроном $V(\xi, S)$ описывается формулой

$$V(\xi, S) = -\frac{E_0}{S} \frac{1}{\xi}, \quad (2)$$

где $\xi = (\rho/2a)$. В гамильтониане (1) НП описывается с помощью модели бесконечно глубокой потенциальной ямы. Здесь и далее энергия измеряется в единицах

$$E_0 = \frac{m_0 e^4}{4\hbar^2} \quad (3)$$

($E_0 = 6,803$ эВ является энергией связи позитрония в вакууме) и вводится безразмерный радиус НП $S = (a/a_{ep})$ (где $a_{ep} = (2\hbar^2/m_0 e^2) = 1,06 \cdot 10^{-1}$ нм — боровский радиус позитрония в вакууме). Поскольку параметр изучаемой квазиульмерной системы $\gamma = ((\varepsilon - 1)/(\varepsilon + 2))$ принимает малое значение ($\approx 0,3$), то в потенциальной энергии гамильтониана (1) можно пренебречь энергией поляризационного взаимодействия электрона и позитрона со сферической поверхностью (НП — среда) считая, что основной вклад в потенциальную энергию гамильтониана (1) вносит энергия кулоновского взаимодействия $V(\xi, S)$ (2) электрона с позитроном [3, 4].

3. Определим энергию связи основного состояния электронно-позитронной пары (ее синглетного состояния, в котором спины 1s-электрона и 1s-позитрона антипараллельны) в НП радиусом S вариационным методом. Для этого найдем решение радиального уравнения Шредингера с гамильтонианом $H(\xi, S)$ (1) вариационным методом. Вариационную радиальную волновую функцию основного состояния электронно-позитронной пары в НП радиусом S зададим в таком виде:

$$\Psi(\xi, S) = L(1 - \xi) \exp\left(-\frac{\nu(S)}{2}\xi\right), \quad (4)$$

где $\nu(S) = 2\beta(S)S$, а $\beta(S)$ — вариационный параметр. Величина $L(\beta(S), S)$, которая определяется из условия нормировки волновой функции (4), принимает значение

$$L(\beta(S), S) = \left(\frac{\beta(S)}{2a_{ep}}\right)^{3/2} \left[1 - \frac{6}{\nu(S)} + \frac{12}{\nu^2(S)} - \left(1 + \frac{6}{\nu(S)} + \frac{12}{\nu^2(S)}\right) \exp(-\nu(S))\right]^{-1/2}. \quad (5)$$

Вариационная волновая функция $\Psi(\xi, S)$, выбранная в виде (4), содержит в себе кулоновскую волновую функцию. Кроме того, она равняется нулю при $\xi = 1$, что соответствует существованию на сферической поверхности раздела (НП — среда) при $\xi = 1$ бесконечно высокого потенциального барьера.

Для определения вариационным методом энергии связи основного состояния электронно-позитронной пары $E(a)$ в НП радиусом a среднее значение гамильтониана $H(\xi, a)$ (1) на волновых функциях $\Psi(\xi, a)$ (4) запишем так:

$$E(a, \beta(a)) = \langle \Psi(\xi, a) | H(\xi, a) | \Psi(\xi, a) \rangle. \quad (6)$$

Расчет зависимости энергии связи $E(a)$ основного состояния электронно-позитронной пары от радиуса НП a получим путем минимизации функционала (6):

$$\frac{\partial E(a, \beta(a))}{\partial \beta(a)} \equiv F(a, \beta(a)) = 0. \quad (7)$$

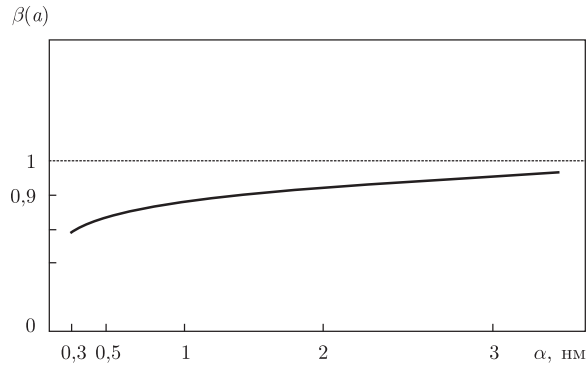


Рис. 1. Зависимость вариационного параметра $\beta(a)$ от радиуса a нанопоры (пунктирная линия — $\beta = 1$)

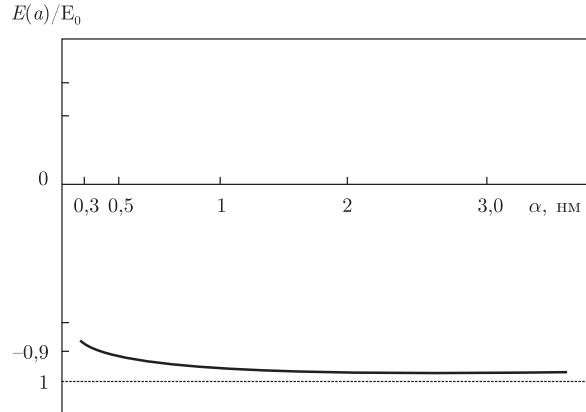


Рис. 2. Зависимость энергии связи $E(a)$ электронно-позитронной пары от радиуса a нанопоры (пунктирная линия — значение энергии связи позитрония в вакууме $E_0 = 6,803$ эВ)

Опуская громоздкие выражения для функционала (6), приведем здесь численное решение уравнения (7) в виде графика зависимости $\beta(a)$ (рис. 1). Из рис. 1 следует, что решением этого уравнения является функция $\beta(a)$, которая монотонно слабо меняется в пределах

$$0,78 \leq \beta(a) \leq 0,98 \quad (8)$$

при изменении радиуса a НП в интервале

$$0,3 \text{ нм} \leq a \leq 3 \text{ нм}. \quad (9)$$

Подставляя значения вариационного параметра $\beta(a)$ (8), взятого из графика зависимости $\beta(a)$ (см. рис. 1), одновременно с соответствующими значениями радиуса a НП из интервала (9) в функционал (6), получим энергию связи основного состояния электронно-позитронной пары $E(a)$ как функцию a НП (рис. 2).

4. Значения функции $\beta(a)$ (8) и энергии связи электронно-позитронной пары $E(a)$ (6) в НП, радиусы которых определялись условием (9), были здесь получены в условиях эксперимента [1]. В [1] было установлено, что в НП, содержащихся в твердой фазе триглицеридов жирных кислот, радиусы которых изменялись в интервале $0,3 \text{ нм} \leq a \leq 0,5 \text{ нм}$, возникал водородоподобный атом позитрония с энергией связи $E_{p_s} = -6,77$ эВ.

В (1) также показано, что в триглицеридах термодинамически наиболее стабильные НП имели радиус $\bar{a} = 0,355$ нм. Вариационный расчет энергии связи основного состояния

электронно-позитронной пары в НП радиусом $\bar{a} = 0,355$ нм дает значение $E = -6,0$ эВ (см. рис. 2), которое незначительно (в пределах $\Delta = |(E_{p_s} - E)/E_{p_s}| \approx 11,4\%$) отличается от энергии связи $E_{p_s} = -6,77$ эВ, полученной в [1]. Такое отличие, по-видимому, обусловлено неучетом в гамильтониане (1) энергии поляризационного взаимодействия электронно-позитронной пары со сферической поверхностью раздела (НП – среда), а также тем, что вариационный расчет может давать завышенные значения энергии связи квазичастиц [5].

Следует отметить, что полученное нами выражение $E(a)$ (6), описывающее энергию связи электронно-позитронной пары в НП радиусом a , позволило проследить предельный переход в НП большого радиуса (например, при $a \approx 3$ нм) вариационного параметра $\beta(a)$ к значению $\beta = 1$, а также энергии связи $E(a)$ (6) к значению энергии связи позитрония $E_0 = 6,803$ эВ (3) в вакууме (см. рис. 1 и 2).

Под объемным позитронием в НП подразумевается позитроний, структура которого (приведенная эффективная масса, боровский радиус, энергия связи) в НП не отличается от структуры позитрония в вакууме. Таким образом, объемный парапозитроний возникает в основном состоянии только в НП с радиусом $a > a_c \approx 3$ нм (см. рис. 2). Причем образование такого объемного парапозитрония носит пороговый характер и возможно лишь в НП, радиус a которой превышает значение некоторого критического радиуса a_c НП.

В настоящей работе показано, что полученное вариационным методом выражения $E(a)$ (6) (см. рис. 2), описывающее энергию связи основного состояния электронно-позитронной пары как функцию радиуса a НП, определяется перенормировкой энергии кулоновского взаимодействия электрона с позитроном $V(\xi, S)$ (2), связанной с чисто пространственным ограничением области квантования объемом НП. Найденное при этом значение энергии связи парапозитрония $E(a = \bar{a})$ в НП радиусом $\bar{a} = 0,355$ нм слабо отличалось от экспериментального значения E_{p_s} . Установлено, что возникновение основного состояния объемного парапозитрония носит пороговый характер и возможно лишь в НП, радиус которой a превышал значение некоторого критического радиуса $a_c \approx 3$ нм.

1. *Нилценко М. М., Лясторович С. П.* Позитронная спектроскопия нанопористых материалов // Наносистемы, наноматериалы, нанотехнології. – 2003. – **1**, № 1. – С. 193–259.
2. *Шпак А. П., Куницкий Ю. А., Карбовский В. Л.* Кластерные наноструктурные материалы. Т. 2. – Киев: ИД “Академперіодика”, 2003. – 548 с.
3. *Pokutnyi S. I.* Size quantization of exciton in semiconductor quantum dots // Phys. Low. – Dim. Struct. – 2002. – No 7/8. – P. 39–48.
4. *Покутній С. І.* Спектроскопія екситонних станів в квазінульвимірних напівпровідникових системах // Укр. фіз. журн. Огляди. – 2006. – **3**, № 1. – С. 46–69.
5. *Мигдал А. В.* Качественные методы в квантовой теории. – Москва: Наука, 1975. – 248 с.

*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова
НАН Украины, Киев*

Поступило в редакцию 17.05.2010

Academician of the NAS of Ukraine **A. P. Shpak, S. I. Pokutnyi, V. N. Uvarov,
M. S. Pokutnyi**

Binding energy of an electron-positron pair in nanovoids of triglycerides

The dependence of the binding energy of an electron-positron pair in a nanovoid in triglyceride on the nanovoid radius is studied. The threshold character of the appearance of a ground state of a bulk parapositronium in a nanovoid is established, and the critical radius of the nanovoid, above which a volume parapositronium can be formed in the nanovoid, is determined.