

М. І. Ворона*, О. А. Лебедь

Інститут прикладної фізики НАН України, Суми, Україна

*Відповідальний автор: marina-vara@ukr.net

ШВИДКІСТЬ АНІГІЛЯЦІЇ ПОЗИТРОНІВ У ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТАХ РЕАКТОРНИХ МАТЕРІАЛІВ У МОДИФІКОВАНІЙ МОДЕЛІ ТАО - ЕЛДРУПА¹

Розвинуто теоретичні уявлення про процес анігіляції позитронів у конструкційних матеріалах ядерних реакторів з урахуванням особливостей їхньої електронної структури. Модифіковано модель Тао - Елдрупа, яка дає змогу аналітично розрахувати час життя позитронів у сферично симетричній потенціальній ямі, на випадок потенціальної ями скінченної висоти для розширення меж застосування моделі. Визначено залежності часу життя позитронів від висоти та ширини потенціальної ями, що виникає в місці точкових дефектів. Результати, отримані в рамках модифікованої моделі, дають важливу інформацію для аналізу спектрів часу життя позитронів в опромінених матеріалах та дані для верифікації кількісних розрахунків методами функціоналу щільності.

Ключові слова: спектри часу життя, анігіляція позитрона в матеріалі, дефектна структура, потенціальна яма, тунелювання.

M. I. Vorona*, O. A. Lebed

Institute of Applied Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, Sumy, Ukraine

*Corresponding author: marina-vara@ukr.net

POSITRON ANNIHILATION RATE IN POINT DEFECTS OF REACTOR MATERIALS WITHIN THE MODIFIED TAO - ELDRUP MODEL

Theoretical concepts of the positron annihilation process in structural materials of nuclear reactors, taking into account the peculiarities of their electronic structure, have been developed. The Tao - Eldrup model, which allows to analytically calculate the lifetime of a positron in a spherically symmetric potential well, has been modified for the case of a potential well of finite height, in order to expand the limits of the model's application. The dependence of the positron lifetime on the height and width of the potential well, which occurs at the point defects, was determined. The results obtained within the framework of the modified model provide important information for the analysis of positron lifetime spectra in irradiated materials and data for the verification of quantitative calculations by the method of density functional theory.

Keywords: lifetime spectra, positron annihilation in the material, defective structure, potential well, tunneling.

REFERENCES

1. V.N. Voevodin, I.M. Neklyudov. *Evolution of the Structural-Phase State and Radiation Resistance of Structural Materials* (Kyiv: Naukova Dumka, 2006) 376 p. (Rus)
2. V.F. Zelensky, I.M. Neklyudov, T.P. Chernyaeva. *Radiation Defects and Swelling of Metals* (Kyiv: Naukova Dumka, 1988) 296 p. (Rus)
3. V. Naundorf. Diffusion in metals and alloys under irradiation. *Int. J. Mod. Phys. B* 6(18) (1992) 2925.
4. S.J. Tao. Positronium annihilation in molecular substances. *J. Chem. Phys.* 56(11) (1972) 5499.
5. M. Eldrup, D. Lightbody, J. N. Sherwood. The temperature dependence of positron lifetimes in solid pivalic acid. *J. Chem. Phys.* 63 (1981) 51.
6. R.A. Ferrell. Theory of Positron Annihilation in Solids. *Rev. Mod. Phys.* 28 (1956) 308.
7. W. Brandt, S. Berko, W.W. Walker. Positronium Decay in Molecular Substances. *Phys. Rev.* 120(4) (1960) 1289.
8. A. Ogata, S.J. Tao. Ortho-Positronium Annihilation in Nitric Acid Treated Polypropylene. *J. Appl. Phys.* 41 (1970) 4261.
9. P.R. Gray, C.F. Cook, G.P. Sturm. Correlation of Triplet Positronium Annihilation Parameters with Structural and Electronic Properties of Organic Liquids. *J. Chem. Phys.* 48 (1968) 1145.
10. G. Mori. Positrons around vacancies in Al. *J. Phys. F: Met. Phys.* 7(4) (1977) L89.
11. M.J. Stott, P. Kubica. New approach to the positron distribution in metals and alloys. *Phys. Rev. B* 11(1) (1975) 1.
12. W. Brandt. Positron dynamics in solids. *Appl. Phys.* 5 (1974) 1.
13. R.N. West. *Positron Studies of Lattice Defects in Metals*. In: *Positrons in Solids*. Topics in Current Physics. P. Hautojärvi (Ed.). Vol. 12 (Berlin, Heidelberg, Springer, 1979) p. 89.
14. M. Vorona, O. Lebed. Pseudopotential method for description of positron annihilation in spherically symmetric potential. In: *Problems of Theoretical Physics. Book of Abstracts. XII Conf. of Young Scientists, Kyiv, Ukraine, December 21 - 23, 2021 (Kyiv, 2021) p. 5.*

15. M.J. Puska, R.M. Nieminen. Theory of positrons in solids and on solid surfaces. *Rev. Mod. Phys.* 66 (1994) 841.
16. I.Ya. Dekhtyar. The use of positrons for the study of solids. *Phys. Rep.* 9 (1974) 243.
17. V.I. Grafutin, E.P. Prokopiev. Positron annihilation spectroscopy in materials structure studies. *Physics-Uspekhi* 45 (2002) 59. (Rus)
18. R. Krause-Rehberg, H.S. Leipner. *Positron Annihilation in Semiconductors: Defect Studies* (Berlin, New York, Springer, 1999) 378 p.
19. T. Goworek. Positronium as a Probe of Small Free Volumes. *J. Nucl. Radiochem. Sci.* 1 (2000) 11.
20. L.D. Landau, E.M. Lifshits. *Quantum Mechanics (Non-Relativistic Theory)*. Vol. III (Moskva: Nauka, 1989) 750 p. (Rus)
21. A.B. Dudnyk et al. Digital positron lifetime spectrometer based on the method of $\beta^+\gamma$ -coincidence. *Problems of Atomic Science and Technology* 2(84) (2013) 157. (Rus)
22. F. Tuomisto, I. Makkonen. Defect identification in semiconductors with positron annihilation: Experiment and theory. *Rev. Mod. Phys.* 85(4) (2013) 1583.
23. R.M. Nieminen, E. Boroński, L.J. Lantto. Two-component density-functional theory: Application to positron states. *Phys. Rev. B* 32(2) (1985) 1377.
24. E. Boroński, R.M. Nieminen. Electron-positron density-functional theory. *Phys. Rev. B* 34(6) (1986) 3820.

Надійшла/Received 10.01.2023