• Schrödingerova rovnice

= nerelativistická rovnice pro pohyb elektronu

$$\left[\frac{\widehat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + V(\boldsymbol{x}, t)\right]\psi(\boldsymbol{x}, t) = i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{x}, t)}{\partial t}$$

$$\hat{p}^2 = -\hbar^2 rac{\partial^2}{\partial x^2} = -\hbar^2 
abla^2$$
 (operátor hybnosti<sup>2</sup>)

Není relativistická (kovariantní), je tedy použitelná jen pro rychlosti v << c, což ale neplatí např. pro e<sup>-</sup> v těžších prvcích.

Teorie relativity: prostoročas, Lorentzova transformace 4-vektorů mezi soustavami pohybujícími se různou rychlostí. To je neslučitelné s rovnicí, kde je 1. časová a 2. prostorová derivace.



Erwin Schrödinger 1933 Nobelova cena • Diracova rovnice

= relativistická rovnice pro pohyb elektronu

$$(\alpha \widehat{p}c + \beta mc^2)\psi(\mathbf{x}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t}$$

Matematicky funguje jen pokud  $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) \ a \ \beta$  jsou matice alespoň 4x4  $\rightarrow$  rovnice pro 4 komponenty  $\psi$ ... e<sup>-</sup> se 2 stavy spinu, ale co ty další 2 komponenty?

P.A.M. Dirac, The Quantum Theory of The Electron, Proc. R. Soc. Lond. A 117, 610-624 (1928)

P.A.M. Dirac, A Theory of Electrons and Protons, Proc. R. Soc. Lond. A 126, 360-365 (1930)

P.A.M. Dirac, Quantised Singularities in the Electromagnetic Field, Proc. R. Soc. Lond. A 133, 60-72 (1931)



Paul Adrien Maurice Dirac 1933 Nobelova cena

- Diracova rovnice
  - Další záhada: má řešení s negativní energií.
  - Energetické hladiny nejsou zespoda omezené.
  - Jak to že e<sup>-</sup> nespadnou do  $E = -\infty$ ?
  - Dirac: Protože stavy se zápornou energií jsou už obsazené!
     (a žádné 2 fermiony nemohou být ve stejném stavu)
    - "Diracovo moře elektronů" (vakuum)
    - Elektrony s E < 0 jsou v kladném "želé", které přesně vyvažuje jejich náboj.



- Diracova rovnice
  - Další záhada: má řešení s negativní energií.
  - Energetické hladiny nejsou zespoda omezené.
  - Jak to že e<sup>-</sup> nespadnou do  $E = -\infty$ ?
  - Dirac: Protože stavy se zápornou energií jsou už obsazené!
     (a žádné 2 fermiony nemohou být ve stejném stavu)
    - "Diracovo moře elektronů" (vakuum)
    - Elektrony s E < 0 jsou v kladném "želé", které přesně vyvažuje jejich náboj.
  - Co když se e<sup>-</sup> z "Diracova moře" excituje?



- Diracova rovnice
  - Další záhada: má řešení s negativní energií.
  - Energetické hladiny nejsou zespoda omezené.
  - Jak to že e<sup>-</sup> nespadnou do  $E = -\infty$ ?
  - Dirac: Protože stavy se zápornou energií jsou už obsazené!
     (a žádné 2 fermiony nemohou být ve stejném stavu)
    - "Diracovo moře elektronů" (vakuum)
    - Elektrony s E < 0 jsou v kladném "želé", které přesně vyvažuje jejich náboj.
  - Co když se e<sup>-</sup> z "Diracova moře" excituje?
    - Vznikne kladná
    - tvorba páru elektron-pozitron



- Diracova rovnice
  - Další záhada: má řešení s negativní energií.
  - Energetické hladiny nejsou zespoda omezené.
  - Jak to že e<sup>-</sup> nespadnou do  $E = -\infty$ ?
  - Dirac: Protože stavy se zápornou energií jsou už obsazené!
     (a žádné 2 fermiony nemohou být ve stejném stavu)
    - "Diracovo moře elektronů" (vakuum)
    - Elektrony s E < 0 jsou v kladném "želé", které přesně vyvažuje jejich náboj.
  - Co když se e⁻ z "Diracova moře" excituje?
    - Vznikne díra pozitron
  - Zaplnění díry



- Diracova rovnice
  - Další záhada: má řešení s negativní energií.
  - Energetické hladiny nejsou zespoda omezené.
  - Jak to že e<sup>-</sup> nespadnou do  $E = -\infty$ ?
  - Dirac: Protože stavy se zápornou energií jsou už obsazené!
     (a žádné 2 fermiony nemohou být ve stejném stavu)
    - "Diracovo moře elektronů" (vakuum)
    - Elektrony s *E* < 0 jsou v kladném "želé", které přesně vyvažuje jejich náboj.
  - Co když se e<sup>-</sup> z "Diracova moře" excituje?
    - Vznikne díra pozitron
  - Zaplnění díry anihilace



#### Pozitron – experiment



Částice letěla mlžnou komorou směrem nahoru (ztratila energii ve folii). Podle směru zakřivení dráhy měla kladný náboj. Proton by více ionizoval.



Carl David Anderson 1936 Nobelova cena

#### The Positive Electron

CARL D. ANDERSON, California Institute of Technology, Pasadena, California (Received February 28, 1933)

Out of a group of 1300 photographs of cosmic-ray tracks in a vertical Wilson chamber 15 tracks were of positive particles which could not have a mass as great as that of the proton. From an examination of the energy-loss and ionization produced it is concluded that the charge is less than twice, and is probably exactly equal to, that of the proton. If these particles carry unit positive charge the curvatures and ionizations produced require the mass to be less than twenty times the electron mass. These particles will be called positrons. Because they occur in groups associated with other tracks it is concluded that they must be secondary particles ejected from atomic nuclei.

Editor

O<sup>N</sup> August 2, 1932, during the course of photographing cosmic-ray tracks produced in a vertical Wilson chamber (magnetic field of 15,000 gauss) designed in the summer of 1930 by Professor R. A. Millikan and the writer, the tracks shown in Fig. 1 were obtained, which seemed to be interpretable only on the basis of the existence in this case of a particle carrying a positive charge but having a mass of the same order of magnitude as that normally possessed by a free negative electron. Later study of the

electrons happened to produce two tracks so placed as to give the impression of a single particle shooting through the lead plate. This assumption was dismissed on a probability basis, since a sharp track of this order of curvature under the experimental conditions prevailing occurred in the chamber only once in some 500 exposures, and since there was practically no chance at all that two such tracks should line up in this way. We also discarded as completely untenable the assumption of an electron of 20

#### Pozitron – experiment

- pozitron = antičástice elektronu
  - klidová hmotnost  $m_e$
  - náboj +*e*
  - spin 1/2





B = 1.7 T P = 425 kWm > 3 t



• β<sup>+</sup> rozpad

$$^{A}_{Z}X \rightarrow {}^{A}_{Z-1}Y + e^{+} + \nu_{e}$$

záchyt e<sup>-</sup> (EC)

$$^{A}_{Z}X + e^{-} \rightarrow {}^{A}_{Z-1}Y + \nu_{e}$$

 $^{22}_{11}$ Na  $\rightarrow ^{22}_{10}$ Ne<sup>\*</sup> +  $e^{+}$  +  $\nu_e$ 

$$^{22}_{11}$$
Na +  $e^- \rightarrow ^{22}_{10}$ Ne<sup>\*</sup> +  $\nu_e$ 

pro  $Q < 2m_ec^2$  pouze EC



- $\beta^+$  rozpad
- branching ratio (e<sup>+</sup> yield)
- Q-value ( $E_{\max}$ )
- poločas rozpadu ( $T_{1/2}$ )
- sekundární foton

Isotope	T <sub>1/2</sub>	e+ yield	E <sub>max</sub> [MeV]	secondary $\gamma$	$E_{\gamma}$ [MeV]
<sup>11</sup> C	20.33 min	0.98	0.45	0	-
<sup>13</sup> N	9.96 min	1.00	1.20	0	-
<sup>15</sup> O	123 s	1.00	1.74	0	-
<sup>18</sup> F	110 min	0.97	0.64	0	-

• příprava v cyklotronu

 $^{1}\text{H} + ^{16}\text{O} \rightarrow ^{13}\text{N} + ^{4}\text{He}$ 

- protony urychlené na T = 5.2 MeV

cyklotron



cyklotron



Siemens Eclipse, negativní jonty 11 Me

negativní ionty 11 MeV výroba <sup>18</sup>F, <sup>11</sup>C, <sup>13</sup>N, <sup>15</sup>O, <sup>64</sup>Cu

UJV Řež: cyklotron U-120M, p+ 5.4–38 MeV

• LINAC (linear accelerator – lineární urychlovač)



#### cyklotron

- branching ratio (e<sup>+</sup> yield)
- Q-value ( $E_{max}$ )
- poločas rozpadu ( $T_{1/2}$ )
- sekundární foton

Isotope	T <sub>1/2</sub>	e+ yield	E <sub>max</sub> [MeV]	secondary $\gamma$	$E_{\gamma}$ [MeV]
<sup>11</sup> C	20.33 min	0.98	0.45	0	-
<sup>13</sup> N	9.96 min	1.00	1.20	0	-
<sup>15</sup> O	123 s	1.00	1.74	0	-
<sup>18</sup> F	110 min	0.97	0.64	0	-
<sup>22</sup> Na	2.6 y	0.9	0.545	1	1.274
<sup>26</sup> AI	8×10⁵ y	0.85	1.17	1	1.81
<sup>44</sup> Ti	47 y	0.94	1.47	1	1.156
<sup>64</sup> Cu	12.7 h	0.178	0.653	0	-
<sup>68</sup> Ge	275 d	0.88	1.90	0.02	1.078
<sup>82</sup> Sr	23.4 d	1	3.38	0	-

• <sup>64</sup>Cu



- <sup>68</sup>Ge / <sup>68</sup>Ga generátor
  - rozpad <sup>68</sup>Ge ( $T_{1/2} = 275$  d) záchyt e<sup>-</sup> (100%) 0.85  $^{68}_{32}\text{Ge} + e^- \rightarrow ^{68}_{31}\text{Ga} + \nu_e$ 32Ge<sup>68</sup> 275d 0.57 0.34 0.17 [~.100% ε] 6.8 - rozpad <sup>68</sup>Ga ( $T_{1/2} = 68 \text{ min}$ ) 11 <0.006 31Ga<sup>68</sup> 68<sup>m</sup> 0.11 β<sup>+</sup> rozpad (87.2%) 2+ [0.11% ε] 5.7 2.31 5. 5. (1<sup>+</sup>, 2<sup>+</sup>) [0.26% ε] 5.8  ${}^{68}_{31}\text{Ga} \rightarrow {}^{68}_{30}\text{Zn} + e^+ + \nu_e$ 1.88 1.24 0.81 0.81 3.23 1.07 2+ [1.3% β+, 1.7% ε] 5.4 1.88 88 D 5 [87.2% β+, 9.5% ε] 5.2 0 <sub>30</sub>Zn<sup>68</sup>

• příprava <sup>68</sup>Ge (cyklotron)

 $^{2}_{1}\text{D} + ^{69}_{31}\text{Ga} \rightarrow ^{68}_{32}\text{Ge} + 3n$ 

- − D ionty urychlené na T ≥ 14 MeV
- maximální účinný průřez pro T = 27 MeV
   je σ = 550 mBarn

 $^{2}_{1}\text{D} + ^{69}_{31}\text{Ga} \rightarrow ^{69}_{32}\text{Ge} + 2n$ 

- pro T = 27 MeV je  $\sigma$  = 1650 mBarn
- poločas rozpadu <sup>69</sup>Ge je  $T_{1/2} = 39$  h



## Zdroje pozitronů <sup>68</sup>Ge / <sup>68</sup>Ga



- <sup>22</sup>Na
  - β<sup>+</sup> rozpad (90.4% + 0.06%)

 $^{22}_{11}\text{Na} \rightarrow ^{22}_{10}\text{Ne}^* + e^+ + \nu_e$ 

poločas rozpadu  $T_{1/2} = 2.6$  y

sekundární  $\gamma$  1274 MeV  $t_{1/2} = 3.7 \text{ ps}$ 

záchyt e<sup>-</sup> (9.5%)

 $^{22}_{11}$ Na +  $e^- \rightarrow ^{22}_{10}$ Ne<sup>\*</sup> +  $\nu_e$ 



- příprava <sup>22</sup>Na (cyklotron)
  - $p^+ + {}^{24}_{12}\text{Mg} \rightarrow {}^{22}_{12}\text{Mg} + {}^{2}_{1}\text{H} + n$
  - $^{22}_{12}\mathrm{Mg} \rightarrow ^{22}_{11}\mathrm{Na} + e^+ + \nu_e$
  - protony urychlené na T = 66 MeV







- příprava <sup>22</sup>Na (cyklotron)
  - $p^+ + {}^{24}_{12}\text{Mg} \rightarrow {}^{22}_{12}\text{Mg} + {}^{2}_{1}\text{H} + n$
  - $^{22}_{12}\mathrm{Mg} \rightarrow ^{22}_{11}\mathrm{Na} + e^+ + \nu_e$
  - protony urychlené na T = 66 MeV









• <sup>22</sup>Na pozitronový zdroj (KFNT)





### Hloubka průniku pozitronů

- pozitrony emitované  $\beta^+$  zářičem
  - pravděpodobnost, že pozitron pronikne do hloubky *z*:  $P(z) = \alpha e^{-\alpha z}$

$$\alpha$$
[cm<sup>-1</sup>] = 16 $\frac{\varrho$ [g cm<sup>-3</sup>]}{E\_{max}^{1.4}[MeV]

- střední hloubka průniku

$$\int_0^\infty z P(z) \mathrm{d}z = \frac{1}{\alpha}$$

*ρ* – hustota materiálu

 $E_{\rm max} = 0.545 \text{ MeV} \text{ (pro }^{22}\text{Na)}$ 

Příklad:

- Mg:  $\alpha^{-1} = 154 \,\mu\text{m}$
- AI:  $\alpha^{-1} = 99 \ \mu m$

Cu: 
$$\alpha^{-1} = 30 \ \mu m$$

- snížení kinetické energie pozitronu ze ~ 100 keV na ~  $k_BT = 0.03 eV$ ٠
- rychlost ztráty energie při pronikání do materiálu (stopping power):  $S = -\frac{dE}{dx}$

doba termalizace 

$$dt = \frac{dx}{v}$$

$$v = \sqrt{\frac{2E}{m_e}} \qquad \Rightarrow dt = \sqrt{\frac{m_e}{2}} \frac{dx}{\sqrt{E}} = -\sqrt{\frac{m_e}{2}} \frac{dE}{S\sqrt{E}}$$

$$t = -\sqrt{\frac{m_e}{2}} \int_{E_i}^{E_f} \frac{\mathrm{d}E}{S\sqrt{E}}$$

Integrál od  $E_i$  (initial) do  $E_f$  (final)

- snížení kinetické energie pozitronu ze ~ 100 keV na ~  $k_BT = 0.03 eV$
- 1. E > 100 eV
  - nepružné srážky s elektrony
  - elastický rozptyl na jádrech atomů
- 1. 0.1 eV < E < 100 eV
  - excitace elektronů
- 1. E < 0.1 eV
  - rozptyl na fononech (vibračních excitacích atomové mřížky)

#### 1. E > 100 eV

- nepružné srážky s elektrony
- elastický rozptyl na jádrech atomů

$$t_s = -\sqrt{\frac{m_e}{2}} \int_{E_i}^{E_m} \frac{\mathrm{d}E}{S_S \sqrt{E}}$$

- pro 
$$E_m \sim 100 \text{ eV}$$
 je  $t_s \leq 1 \text{ ps}$ 

$$t_s[\text{ps}] = \frac{17.2}{\varrho[\text{g cm}^{-3}]} E_{\text{max}}^{1.2}[\text{MeV}]$$

 $\varrho$  – hustota materiálu

$$E_{\rm max} = 0.545 \,\,{\rm MeV}$$
 (pro <sup>22</sup>Na)

- 2. 0.1 eV < E < 100 eV
  - excitace elektronů
  - kovy: excitace vodivostních elektronů

$$\begin{split} S_R &= \frac{2\pi}{105} \frac{m_e}{\hbar} \sqrt{\frac{2}{m_e}} \frac{E^{5/2}}{E_F} \\ t_R &= -\sqrt{\frac{m_e}{2}} \int_{E_m}^{E_c} \frac{\mathrm{d}E}{S_R \sqrt{E}} \end{split}$$

- pro  $E_c \ll E_m$  je  $t_R \sim 1$  ps

$$t_R = \frac{105\hbar}{8\pi} \frac{E_F}{E_c^2}$$

 $E_F$  – Fermiho energie

- 3. E > 0.1 eV
  - rozptyl na fononech

$$S_{ph} = \frac{2}{\pi} \frac{m_e^3 W^2}{\varrho \hbar^4} E$$

*ρ* – hustota materiálu

$$W - deformační potenciál  $W = bE_F$   
 $(b = 2/5 - 2/3)$$$



- 3. E > 0.1 eV
  - rozptyl na fononech

$$t_{ph} = -\sqrt{\frac{m_e}{2}} \int_{E_c}^{E_f} \frac{\mathrm{d}E}{S_{ph}\sqrt{E}} = 4t_R \sqrt{\frac{E_C}{\frac{3}{2}k_BT} - 1}$$

• celková doba termalizace

$$t = t_S + t_R + t_{ph}$$

např. Cu:  $t_S = 0.93$  ps,  $t_R = 2.86$  ps,  $t_{ph} = 8.92$  ps, t = 12.71 ps

• např. Cu:  $t_S = 0.93$  ps,  $t_R = 2.86$  ps,  $t_{ph} = 8.92$  ps, t = 12.71 ps



## Anihilace pozitronů

• anihilace pozitronu

$$e^- + e^+ \rightarrow n\gamma$$

- n = 1 vylučuje zákon zachování hybnosti (možné pouze v přítomnosti další částice, např. jádra)
- n > 1 pro každý další foton je pravděpodobnost menší faktorem  $\alpha = 1/137$

• n = 2 dominantní proces  $e^- + e^+ \rightarrow \gamma + \gamma$ 



#### Anihilace pozitronů

• účinný průřez pro 2 γ anihilaci pozitronu (Dirac 1930)

$$\sigma_{(2)} = \frac{\pi r_e^2}{\gamma + 1} \left[ \frac{\gamma^2 + 4\gamma + 1}{\gamma^2 - 1} \ln \left( \gamma + \sqrt{\gamma^2 - 1} \right) - \frac{\gamma + 3}{\sqrt{\gamma^2 - 1}} \right]$$
$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\nu^2}{c^2}}}$$



– klasický poloměr elektronu  $r_e = e^2/m_ec^2$ 

• pro 
$$v \ll c$$
 je  $\sigma_{(2)} = \frac{\pi r_e^2 c}{v}$ 

- pravděpodobnost 2  $\gamma$  anihilace  $P_{(2)} = \sigma_{(2)} v n_e = \pi r_e^2 c n_e$  $n_e$  - elektronová hustota

## Vliv nenulové rychlosti elektronů na anihilační fotony

• zákon zachování energie a hybnosti

$$p_L = \frac{E_1}{c} - \frac{E_2}{c} \cos \theta \approx \frac{E_1}{c} - \frac{E_2}{c}$$
$$p_T = \frac{E_2}{c} \sin \theta \approx \frac{m_0 c^2}{c} \theta$$

• Dopplerův posun energie  $\Delta E$ 

$$E_1 - E_2 = 2\Delta E = cp_L$$

 $E_1 + E_2 = 2m_0 c^2$ 

• odchylka od antikolinearity  $\theta$ 

$$\theta = \frac{p_T}{m_0 c}$$



## Doba života pozitronů

doba života = doba termalizace + doba difúze



## Anihilace pozitronů - pozorovatelné

- doba života pozitronů LT  $(\tau, E) \rightarrow$  scintilační detektory
- úhlové korelace ACAR  $(\tau, \theta) \rightarrow \text{scintilační detektory}$
- a stattle Yes ( stats to be a sec
- Dopplerovské rozšíření **DB**  $(E, \tau) \rightarrow$  polovodičové detektory
- scintilační detektory (scintilátor + fotonásobič)
  - výborné časové rozlišení
  - horší energetické rozlišení
- polovodičové detektory (HPGe)
  - vynikající energetické rozlišení
  - špatné časové rozlišení

## Měření doby úhlových korelací (ACAR)

• long slit geometrie



## Měření doby úhlových korelací (ACAR)



$$\theta = \frac{p_T}{m_0 c} \qquad \Delta E = \frac{1}{2} c p$$

- mapování hybností v monokrystalech
- izotropní rozdělení v polykrystalech



## Měření Dopplerovského rozšíření (DB)



## Srovnání rozlišení DB vs ACAR

 $p_T$ 

 $m_0 c$ 

• ACAR 
$$\theta =$$

neurčitost úhlu  $\Delta \theta \approx 1 \text{ mrad}$ 

$$\Rightarrow \Delta p_T \approx \Delta \theta \, \frac{m_0 c^2}{c} \approx 0.5 \, \frac{\text{keV}}{c}$$

$$\Delta E = \frac{1}{2} p_L c$$

neurčitost energie  $\Delta E \approx 1 \text{ keV}$ 

$$\Rightarrow \Delta p_L \approx \frac{2\Delta E}{c} \approx 2\frac{\mathrm{keV}}{c}$$

## Měření Dopplerovského rozšíření – tvarové parametry



- S = míra podílu anihilací e⁺ s valenčními e⁻
   →nárůst koncentrace defektů = nárůst S parametru
- W = míra podílu anihilací e<sup>+</sup> s core e<sup>-</sup> (chemické okolí defektu)

## Měření Dopplerovského rozšíření – tvarové parametry



## Srovnání s mikrotvrdostí



## Koincidenční měření Dopplerovského rozšíření (CDB)

- $E_1 E_2 = 2\Delta E$ 
  - Dopplerovský posun
- $E_1 + E_2 = 2m_0c^2$ 
  - rozlišovací funkce





10 100

1000 10000

100000

### Koincidenční měření Dopplerovského rozšíření (CDB)

• podílové CDB křivky = chemické okolí defektu



## Měření doby života pozitronů – analogový spektrometr



## Měření doby života pozitronů – analogový spektrometr



### Měření doby života pozitronů – analogový spektrometr



## Měření doby života pozitronů – digitální spektrometr



## Měření doby života pozitronů

- referenční vzorek vyžíhané α-Fe (99.999%)
- zářič <sup>22</sup>Na (1.2 MBq)
- celková statistika 8 × 10<sup>6</sup>
- $\alpha$ -Fe:  $\tau = 107.0(3)$  ps
- časové rozlišení 145 ps (FWHM)







# Měření doby života pozitronů



- doby života → typy defektů
- intenzity  $\rightarrow$  koncentrace defektů