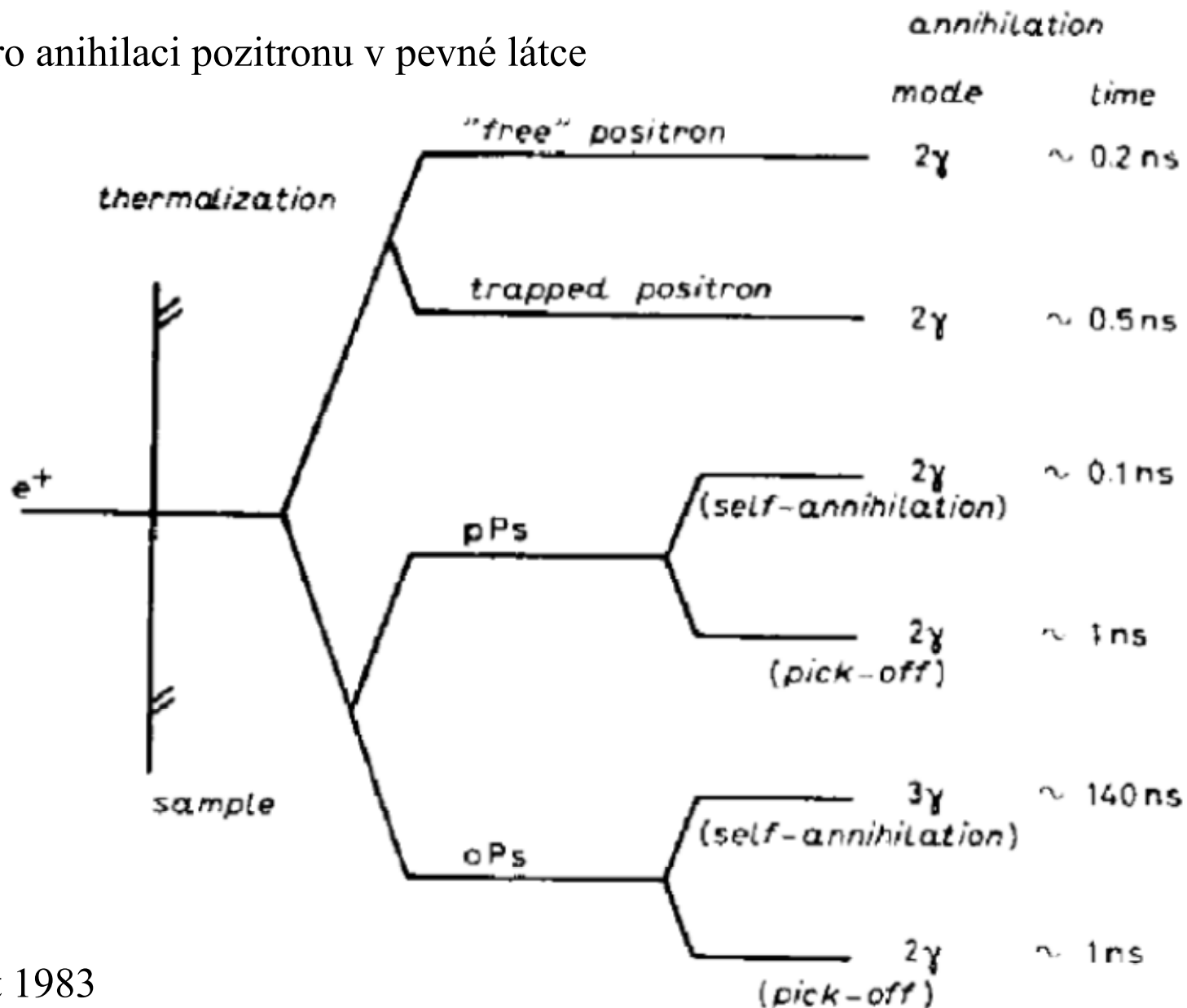


Pozitronium

- schéma kanálů pro anihilaci pozitronu v pevné látce



Pozitronium

- **Pozitronium (Ps)** - vodíku-podobný vázaný stav pozitronu a elektronu $\Psi_{n,l,m}(\mathbf{r})|S,S_z\rangle$
- singletní stav 1S_0 , **para-pozitronium (p-Ps)**, opačně orientované spiny ($S = 0, M_s = 0$)
- doba života ve vakuu 125 ps (2γ self-anihilace) $\frac{2\hbar}{m_0c^2\alpha^5}$ $|S=0,S_z=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle)$,
- tripletní stav 3S_1 , **ortho-pozitronium (o-Ps)**, souhlasně orientované spiny ($S = 1, M_s = -1, 0, 1$)
- doba života ve vakuu 142 ns (3γ self-anihilace) $\frac{\frac{9}{2}h}{2m_0c^2\alpha^6(\pi^2 - 9)}$
- maximální doba života pozitronu v materiálu $\tau_{\max} = 500$ ps $|S=1,S_z=1\rangle = |\uparrow\rangle|\uparrow\rangle$,

$$|S=1,S_z=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle),$$

$$|S=1,S_z=-1\rangle = |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle,$$

$$\tau_{\max}^{-1} = \frac{1}{4} \frac{1}{\tau_{p-Ps}} + \frac{3}{4} \frac{1}{\tau_{o-Ps}}$$

Pozitronium

- **Pozitronium (Ps)** – energetické hladiny
- analogicky jako u atomu vodíku, ale redukovaná hmotnost je zhruba poloviční

- redukovaná hmotnost Ps:
$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_{e^-}} + \frac{1}{m_{e^+}} = \frac{2}{m_0}$$

- energetické hladiny Ps:
$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{\mu e^4}{8h^2 \varepsilon_0^2} = -\frac{1}{n^2} \frac{m_0}{4\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \right)^2$$

$$e^2 = 4\pi\hbar\alpha\varepsilon_0 c$$

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{m_0}{4} \alpha^2 c^2 = -\frac{1}{n^2} \frac{511 \times 10^3}{4 \times 137^2} \text{ eV} = -\frac{1}{n^2} 6.8 \text{ eV}$$

- základní stav Ps: $E_1 = -6.8 \text{ eV}$
- 1. excitovaný stav Ps: $E_2 = -1.7 \text{ eV}$
- 'velikost' Ps: $\approx 1 \text{ \AA}$

Vznik pozitronia

- **Oreho model**

- Ps vzniká v izolantech během termalizace pozitronu

- v oblasti energií $E_i - E_{Ps} < E < E_{ex}$ (Oreho pás)

- E_i – ionizační energie

- $E_{Ps} = 6.8 \text{ eV}$ – vazebná energie Ps

- E_{ex} – nejmenší excitační energie elektronu

- **Spur model**

- pozitron je během termalizace doprovázen oblakem volných elektronů vzniklých ionizací

- Ps vzniká interakcí pozitronu s jedním z těchto elektronů

Volný objem

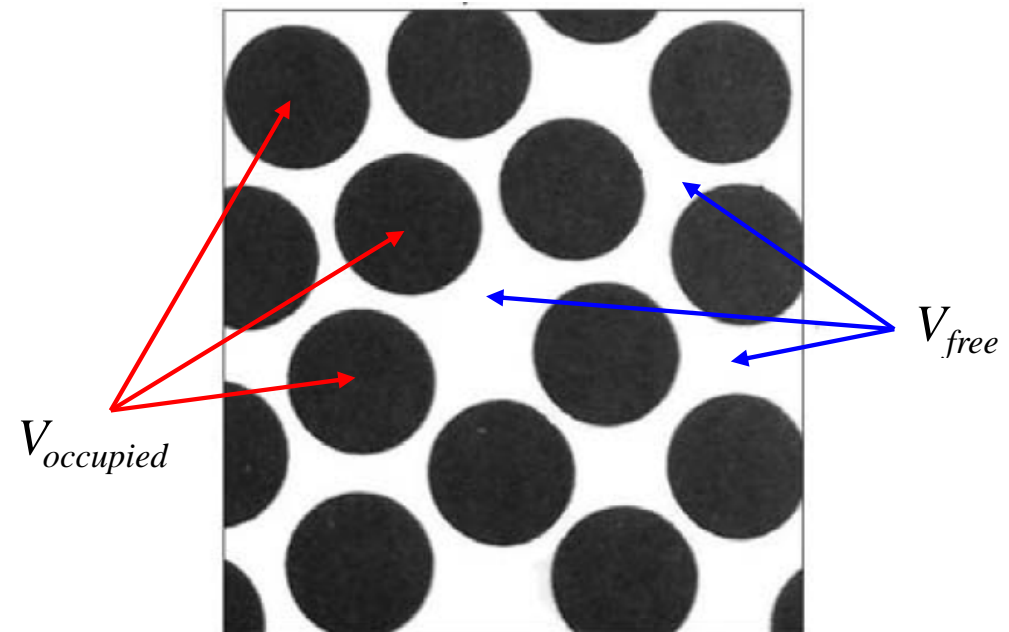
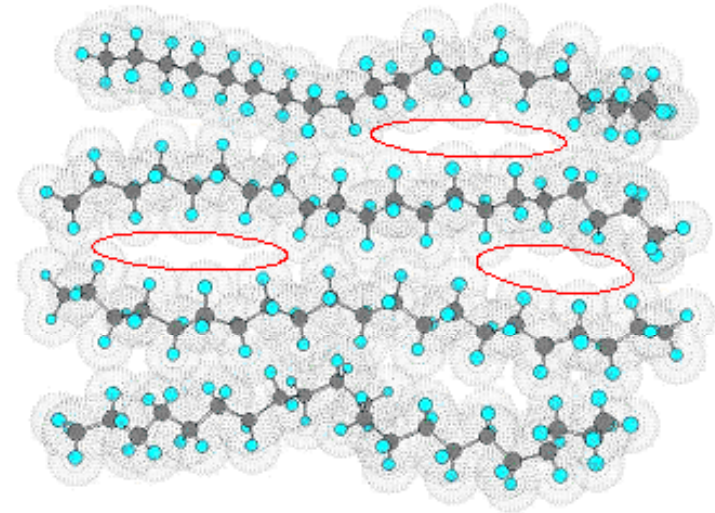
- **polymery**
- nedokonalé (tj. ne nejtěsnější možné) uspořádání polymerních řetězců
- **volný objem**

$$V_{free} = V_{total} - V_{occupied}$$

- **frakční volný objem**

$$f_V = \frac{V_{free}}{V_{total}}$$

- typický rozměr volných objemů $\approx \text{Å}$
- relaxační doba $\approx 10^{-13}$ s



Volný objem

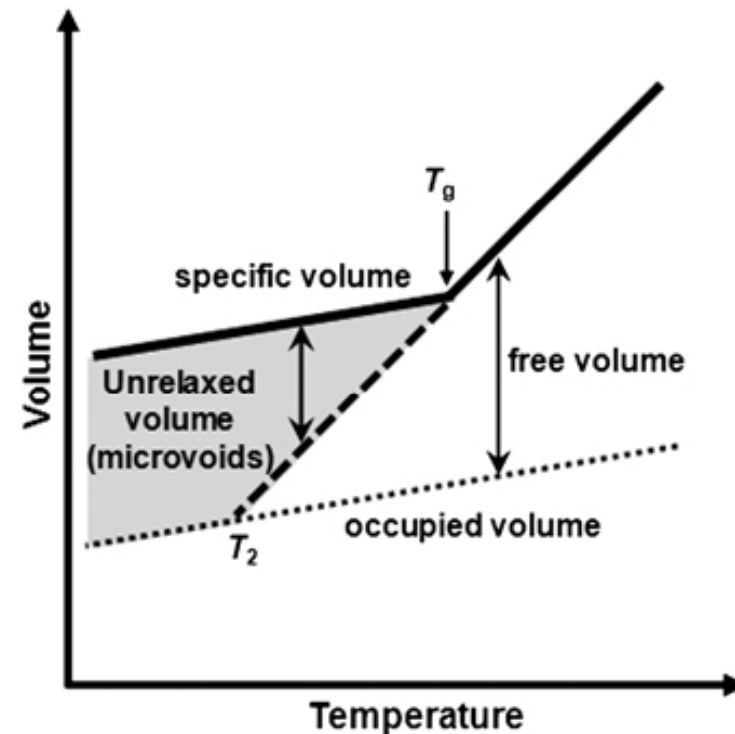
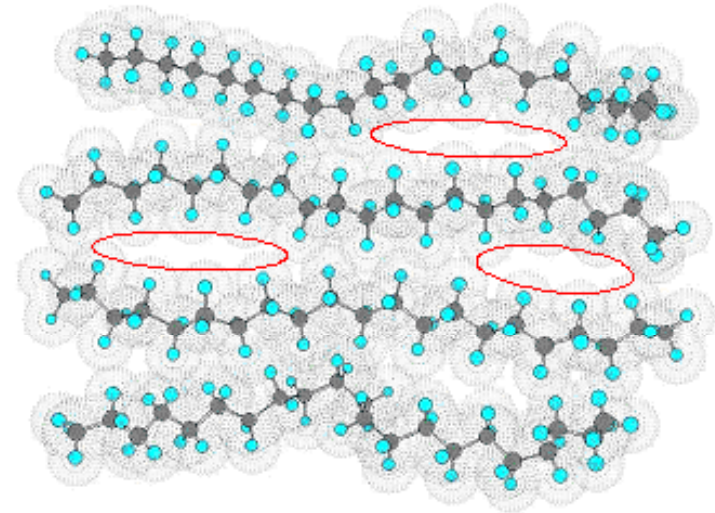
- **polymery**
- nedokonalé (tj. ne nejtěsnější možné) uspořádání polymerních řetězců
- **volný objem**

$$V_{free} = V_{total} - V_{occupied}$$

- **frakční volný objem**

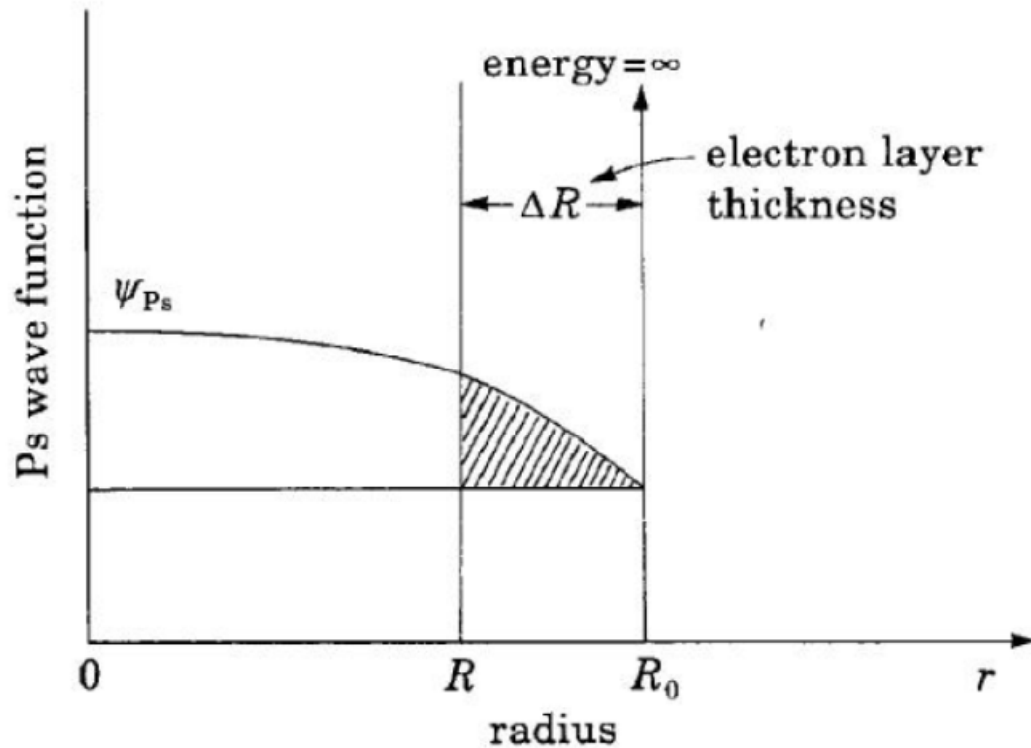
$$f_V = \frac{V_{free}}{V_{total}}$$

- typický rozměr volných objemů $\approx \text{Å}$
- relaxační doba $\approx 10^{-13}$ s



Pick-off anihilace o-Ps

- Ps je lokalizováno ve volných objemech
- pick-off anihilace výrazně zkracuje dobu života o-Ps



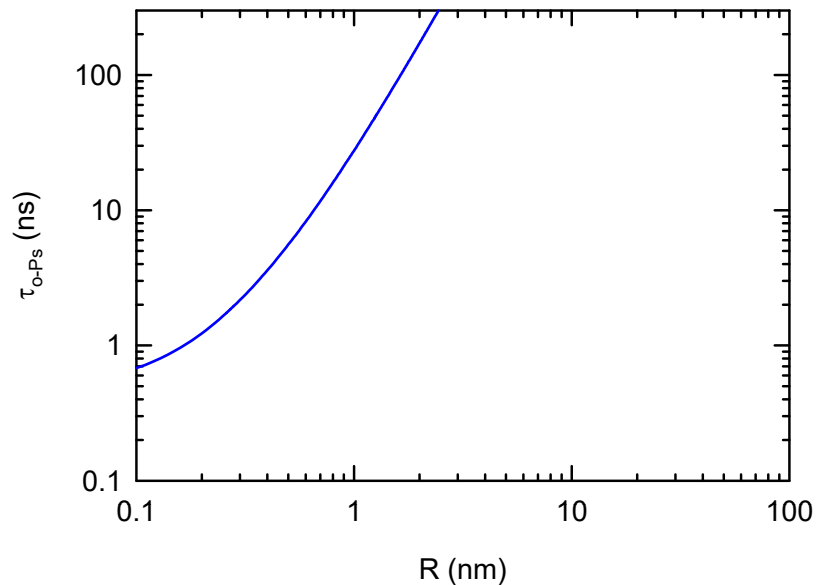
- doba života o-Ps ve volném objemu o poloměru R

$$\tau_{o-Ps} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{R}{R + \Delta R} + \frac{1}{2\pi} \sin \left(\frac{2\pi R}{R + \Delta R} \right) \right]^{-1}$$

- $\Delta R = 1.656 \text{ \AA}$

Pick-off anihilace o-Ps

- Ps je lokalizováno ve volných objemech
- pick-off anihilace výrazně zkracuje dobu života o-Ps



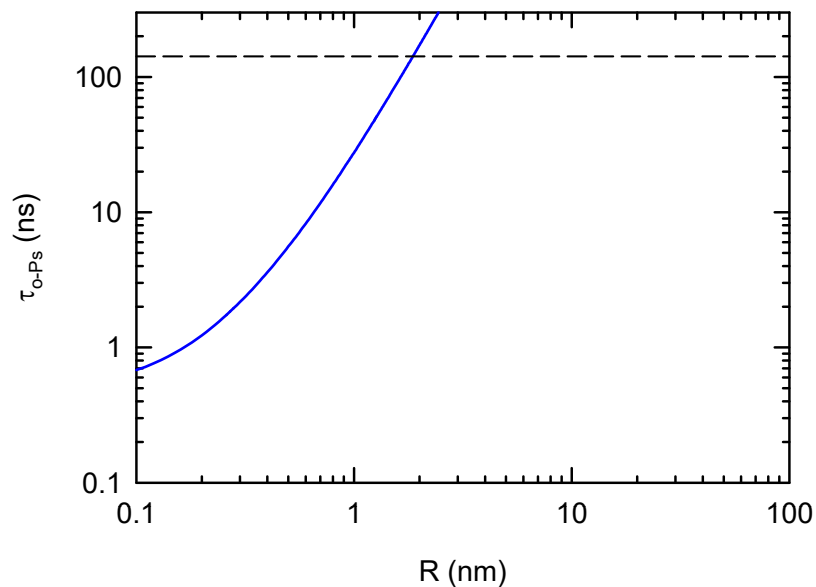
- doba života o-Ps ve volném objemu o poloměru R

$$\tau_{o-Ps} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{R}{R + \Delta R} + \frac{1}{2\pi} \sin\left(\frac{2\pi R}{R + \Delta R}\right) \right]^{-1}$$

- $\Delta R = 1.656 \text{ \AA}$

Pick-off anihilace o-Ps

- Ps je lokalizováno ve volných objemech
- pick-off anihilace výrazně zkracuje dobu života o-Ps



→ doba života 3γ self-anihilace o-Ps: $\tau_{o-Ps} = 142$ ns

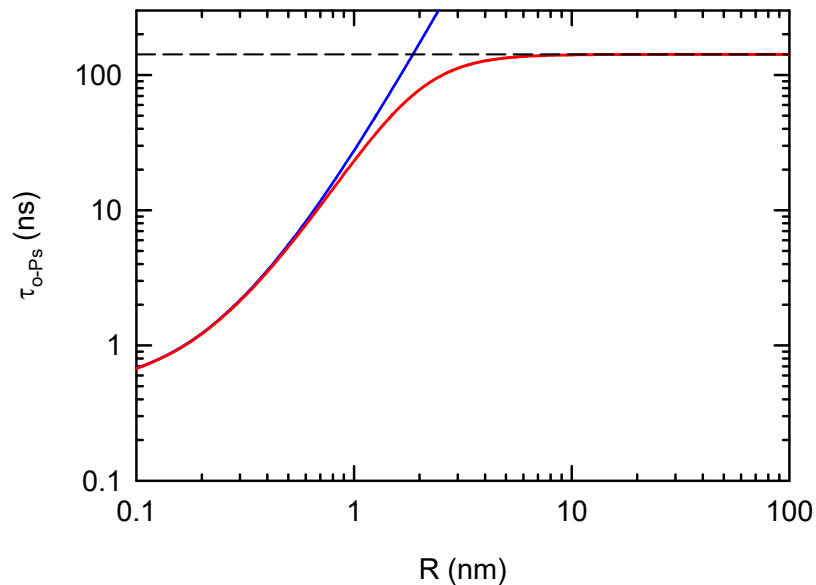
- doba života o-Ps ve volném objemu o poloměru R

$$\tau_{o-Ps} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{R}{R + \Delta R} + \frac{1}{2\pi} \sin\left(\frac{2\pi R}{R + \Delta R}\right) \right]^{-1}$$

- $\Delta R = 1.656 \text{ \AA}$

Pick-off anihilace o-Ps

- Ps je lokalizováno ve volných objemech
- pick-off anihilace výrazně zkracuje dobu života o-Ps



započtení $3-\gamma$ anihilace

$$\tau_{o-Ps}^{-1} = \lambda = \lambda_{pickoff}(R) + \lambda_{3-\gamma}$$

$$\lambda_{pickoff}(R) = 2 \left[1 - \frac{R}{R + \Delta R} + \frac{1}{2\pi} \sin\left(\frac{2\pi R}{R + \Delta R}\right) \right]$$

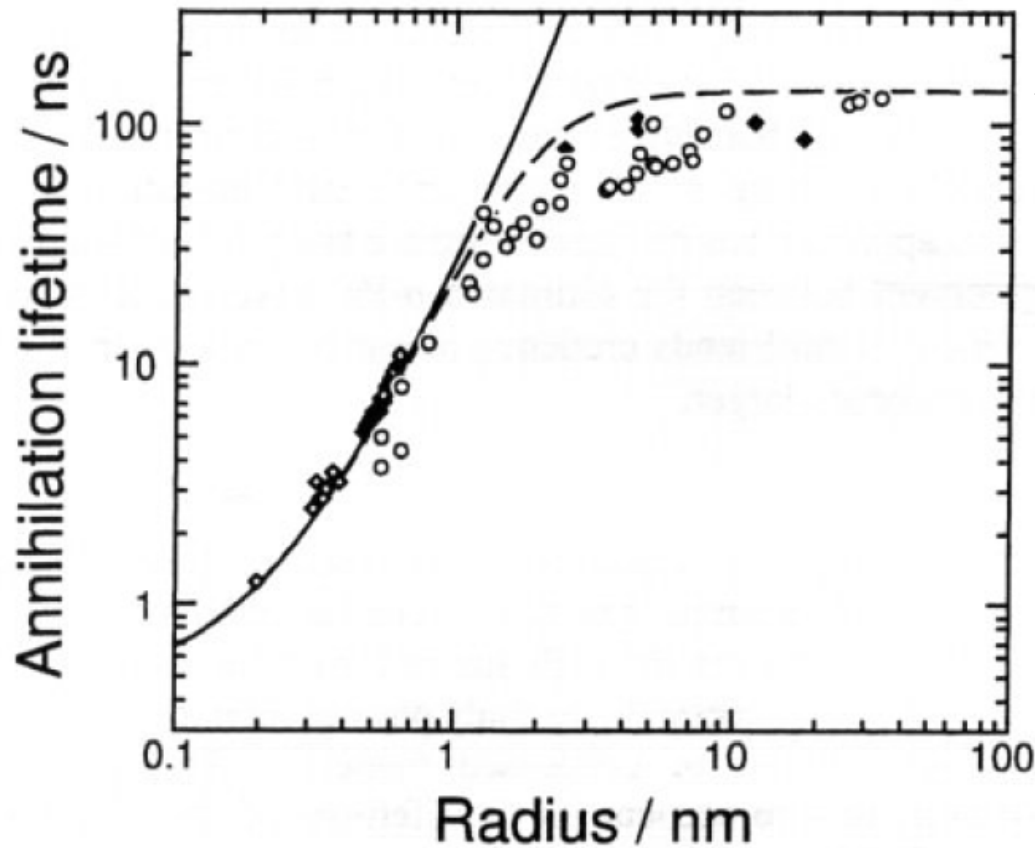
$$\lambda_{3-\gamma} = \frac{1}{142} \text{ ns}^{-1}$$

$$\Delta R = 1.656 \text{ \AA}$$

Pick-off anihilace

- zobecnění Tao-Eldrupova modelu na velké póry (Ito 1999)

Tao-Eldrup
$$\tau_{o-Ps} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{R}{R + \Delta R} + \frac{1}{2\pi} \sin \left(\frac{2\pi R}{R + \Delta R} \right) \right]^{-1}$$



← započtení 3- γ anihilace

$$\tau_{o-Ps}^{-1} = \lambda = \lambda_{pickoff}(R) + \lambda_{3-\gamma}$$

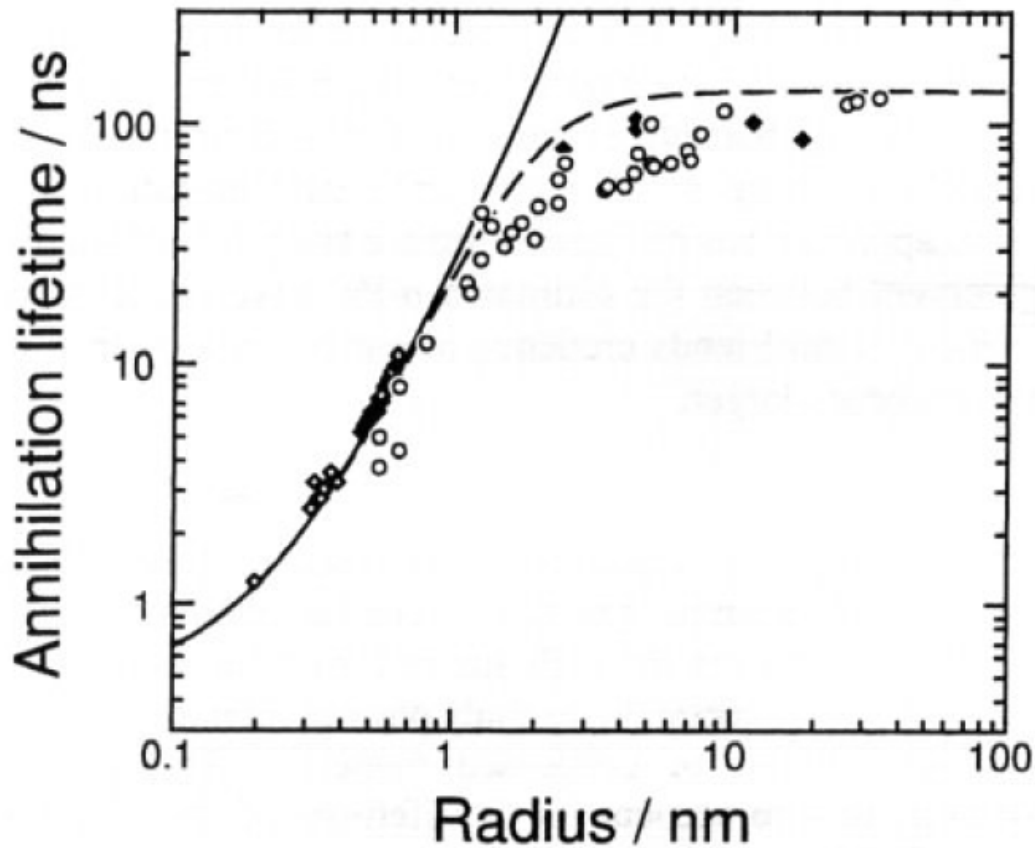
$$\lambda_{pickoff}(R) = 2 \left[1 - \frac{R}{R + \Delta R} + \frac{1}{2\pi} \sin \left(\frac{2\pi R}{R + \Delta R} \right) \right]$$

$$\lambda_{3-\gamma} = \frac{1}{142} \text{ ns}^{-1}$$

$$\Delta R = 1.656 \text{ \AA}$$

Pick-off anihilace o-Ps

- Ps je lokalizováno ve volných objemech
- pick-off anihilace výrazně zkracuje dobu života o-Ps



- doba života o-Ps ve volném objemu o poloměru R

$$\tau_{o-Ps} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{R}{R + \Delta R} + \frac{1}{2\pi} \sin\left(\frac{2\pi R}{R + \Delta R}\right) \right]^{-1}$$

- $\Delta R = 1.656 \text{ \AA}$
- minimální rozměr volného objemu: $2\Delta R \approx 3 \text{ \AA}$

Pick-off anihilace o-Ps

- distribuce velikostí volných objemů
- spektrum dob života pozitronů

$$S(t) = \sum_i \frac{I_i}{\tau_i} e^{-\frac{t}{\tau_i}} + \frac{1}{4} I_{Ps} e^{-\frac{t}{\tau_{p-Ps}}} + \frac{3}{4} I_{Ps} \int_0^{\infty} \lambda \alpha(\lambda) e^{-\lambda t} d\lambda$$

- log-normální rozdělení pdf anihilačních rychlostí o-Ps

$$\alpha(\lambda) = \frac{1}{\sigma_0 \sqrt{2\pi}} \frac{1}{\lambda} \exp\left[-\frac{(\ln \lambda - \ln \lambda_0)^2}{2\sigma_0^2}\right] \quad (\text{Gaussovské rozdělení } N(\lambda_0, \sigma_0) \text{ v logaritmické škále})$$

- střední hodnota doby života o-Ps: $\bar{\tau}_{o-Ps} = \int_0^{\infty} \frac{1}{\lambda} \alpha(\lambda) d\lambda = \frac{1}{\lambda_0} \exp \frac{\sigma_0^2}{2}$

- standardní odchylka doby o-Ps: $\sigma_{o-Ps}^2 = \int_0^{\infty} \left(\frac{1}{\lambda} - \bar{\tau}_{o-Ps}\right)^2 \alpha(\lambda) d\lambda = \frac{1}{\lambda_0} (e^{\sigma_0^2} - 1)$

Pick-off anihilace o-Ps

- distribuce velikostí volných objemů
- spektrum dob života pozitronů

$$S(t) = \sum_i \frac{I_i}{\tau_i} e^{-\frac{t}{\tau_i}} + \frac{1}{4} I_{Ps} e^{-\frac{t}{\tau_{p-Ps}}} + \frac{3}{4} I_{Ps} \int_0^{\infty} \lambda \alpha(\lambda) e^{-\lambda t} d\lambda$$

- rozdělení (pdf) velikostí volných objemů

$$H(R) = -\alpha(\lambda) \frac{d\lambda}{dR} = \frac{-2\Delta R \left(\cos\left(\frac{2\pi R}{R + \Delta R}\right) - 1 \right) \alpha(\lambda)}{(R + \Delta R)^2}$$

$$\lambda = 2 \left[1 - \frac{R}{R + \Delta R} + \frac{1}{2\pi} \sin\left(\frac{2\pi R}{R + \Delta R}\right) \right]$$

$$\alpha(\lambda) = \frac{1}{\sigma_0 \sqrt{2\pi}} \frac{1}{\lambda} \exp\left[-\frac{(\ln \lambda - \ln \lambda_0)^2}{2\sigma_0^2} \right]$$

- korekce na to, že záchyťová rychlost je závislá na velikosti volného objemu: $K(R) = 1 + 8R$

$$H(R) = -\alpha(\lambda) \frac{d\lambda}{dR} = \frac{-2\Delta R \left(\cos\left(\frac{2\pi R}{R + \Delta R}\right) - 1 \right) \alpha(\lambda)}{(R + \Delta R)^2 K(R)}$$

Pick-off anihilace o-Ps

- rozdělení (pdf) velikostí volných objemů:

$$H(R) = -\alpha(\lambda) \frac{d\lambda}{dR} = \frac{-2\Delta R \left(\cos\left(\frac{2\pi R}{R + \Delta R}\right) - 1 \right) \alpha(\lambda)}{(R + \Delta R)^2 K(R)}$$

- rozdělení (pdf) volných objemů

$$F(V) = H(R(V)) \frac{dR}{dV}$$

- sférický tvar volných objemů: $V = \frac{4}{3} \pi R^3 \quad \rightarrow \quad R(V) = \left(\frac{3}{4\pi} V \right)^{1/3}$