

АННИГИЛЯЦИЯ ПОЗИТРОНОВ НА АТОМАХ КОСМИЧЕСКОЙ ПЛАЗМЫ

Е.П. Светлов-Прокопьев

*ФГУП ГНЦ РФ Институт теоретической и экспериментальной физики им. А.И.Алиханова,
Московский институт электронной техники (Технический университет), Москва*

Показано, что образование позитрония в космической плазме с большой концентрацией ионов H^- может происходить посредством образования квазистабильных высоковозбужденных состояний позитрона в системе e^+H^- и последующего ее распада на атом водорода и позитроний. В такой космической плазме возможен практически 100 % выход позитрония, о чем говорят экспериментальные данные космической лаборатории Интеграл.

Введение

Как указывается в [1,2], позитроны с начальной энергией порядка 10^8 эВ в межзвездных магнитных полях (космической плазме) напряженностью $10^{-5} - 10^{-6}$ Э описывают вокруг силовых линий магнитного поля винтовые траектории с радиусом кривизны $R = E/300 \cdot H \approx 10^{10} - 10^{11}$ см, т.е. порядка радиуса Солнца. По космическим меркам это очень малое расстояние, поэтому позитроны практически заперты в области (объеме), в котором они образовались. При прохождении через межзвездный газ с обычной плотностью $n \sim 1$ см⁻³ позитроны участвуют в следующих основных процессах взаимодействия с атомами H [3]: 1) ионизация атомов H, при этом возникают тормозное (за счет взаимодействия с ядерным и атомным полями) и синхротронное (за счет взаимодействия быстрых позитронов с магнитным полем космической плазмы) излучения, 2) аннигиляция на лету, 3) образование атома позитрония (Ps), 4) квазиупругие процессы столкновений с атомами H, 5) образование и распад позитронсодержащих атомных систем с участием водорода e^+H , e^+H^- и других многоэлектронных атомов e^+A , e^+A^- , 6) аннигиляция в межзвездном газе медленных свободных (“квантизермализованных”) позитронов на атомах водорода, гелия и т.д..

Рассмотрим в краткой форме особенности этих процессы, следуя [1,3]. В области высоких энергий позитроны, взаимодействуя с атомами H, теряют свою энергию главным образом на ионизацию атомов водорода и синхротронное излучение. Отметим при этом, что небольшая доля энергии позитронов (< 20 %) теряется на тормозное излучение гамма-квантов и совсем малая доля (< 0,2 %) – на магнитно-тормозное излучение и на столкновения со световыми квантами (обратный комптон-эффект). Время замедления в процессе ионизационных энергетических потерь и потерь энергии за счет синхротронного излучения при плотности $n \sim 1$ см⁻³ и начальной энергии позитрона 10^8 эВ составляет величину порядка 10^{14} с $\sim 3 \cdot 10^6$ лет, а время жизни относительно аннигиляции равно $1,3 \cdot 10^6$ лет [1,3]. Отметим, что эти времена увеличиваются в межгалактической среде примерно на 6 порядков, ибо плотность водорода в этой среде $n \sim 1$ м⁻³. Действительно, общие пробеги позитронов в галактической среде с замедлением их до теплового равновесия с атомами водорода составляют величины порядка $3 \cdot 10^{24}$ см, что примерно в 100 раз больше расстояния до галактического центра. В межгалактической среде это расстояние примерно в миллион раз становится большим, т.е. $3 \cdot 10^{30}$ см, что примерно в 10^8 раз больше расстояния до галактического центра. Однако, как известно [4], галактическое магнитное поле препятствует выходу космических лучей (в том числе и позитронов) в межгалактическое пространство, что приводит к явлению диффузии галактических лучей. Способны выходить в межгалактическое пространство лишь космические лучи с очень высокими энергиями. В галактической среде, по-видимому, наблюдаются потоки позитронов во всех интервалах энергий (от ультрарелятивистских энергий до энергий позитронов, соответствующих энергиям теплового равновесия позитронов с атомами галактической среды) при условии, что источниками позитронов являются галактические объекты (черные дыры, вспышки сверхновых и т.д.) и взаимодействие протонов ядер космических лучей с межзвездным газом (космической плазмой). Отметим, что в приведенных выше

оценках времен различных процессов пренебрегали возможностью различных механизмов ускорения позитронов в галактическом и межгалактическом пространстве [4].

Таким образом, некоторая часть быстрых позитронов теряет свою энергию и замедляется до энергий порядка энергии атомных электронов в галактической и межгалактической средах за время, меньшее, чем время жизни относительно аннигиляции. Как показывают расчеты [1,3], процесс аннигиляции пар на лету в области высоких энергий менее вероятен, чем процесс ионизационных энергетических потерь. Доля позитронов, аннигилирующих на лету, по оценкам [5-7], составляет величину 1 – 3 % от общего числа всех позитронов. В этой области энергий позитроны участвуют в процессе квазиупругих столкновений с поперечным сечением, равным по порядку величины геометрическим размерам атома Н. Время замедления позитронов в этой области энергий определяется выражением [6]

$$t = (2m^{1/2} / \sqrt{2}) (\zeta n \sigma)^{-1} [(1/E_I)^{1/2} - (1/E_0)^{1/2}], \quad (1)$$

где m - масса позитрона, $\zeta = 2m/M$ - средние потери позитрона на одно столкновение, σ - поперечное сечение столкновения, E_I и E_0 - начальная и конечная энергии позитрона соответственно, M - масса атома водорода.

Оценки по этой формуле дают возможность заключить, что t гораздо меньше времени жизни позитрона относительно аннигиляции при столкновениях [3]. Таким образом, позитроны могут быть “квазитермализованными” в атмосфере космической плазмы.

Особенно большое значение имеют процессы образования Ps и квазиатомных систем e^+H и e^+H^- [8-12] в космической плазме, резко укорачивающим время жизни позитрона. Вероятность образования позитрония заключена в пределах

$$(V_I + 6,8 - V_i) / V_I < P < 6,8 / V_i \quad (2)$$

Здесь P - вероятность образования Ps, V_I - энергия первого возбужденного состояния Н, V_i - энергия ионизации атома Н. Процесс образования по Оре [13] рассматривается как эндотермическая реакция замедленного позитрона с атомами Н. Порог этой реакции определяется потенциалом ионизации атома Н $V_i = 13,6$ эВ и потенциалом ионизации Ps 6,8 эВ и оказывается равным $E_{nop} = (V_i - 6,8)$ эВ. Верхним энергетическим пределом является, естественно, положение первого электронного уровня возбуждения атома Н V_i . Пока энергия позитрона превышает V_I , над процессом образования Ps преобладает возбуждение атома Н, а при энергии позитрона, большей V_i - ионизация. Интервал энергии Δ от V_i до $(V_i - 6,8)$ эВ называется щелью Оре. Оценки показывают, что значение щели Оре для атомов Н – величина существенно положительная, и вследствие этого в космической плазме газе возможен обильный выход позитрония. По оценкам для атомов Н, вероятность образования Ps $P \approx 0,3$ [3,5,6,8-12], что также подтверждается более точными детальными расчетами [14]. Отметим, что время жизни ортопозитрония относительно аннигиляции составляет $\tau_o = 1,4 \cdot 10^7$ с, а парапозитрония $\tau_p = 1,25 \cdot 10^{-10}$ с. Не исключено также образования так называемых комплексов Уилера состава $e_2^- e^+$ [15]. Очень медленные позитроны с энергиями, меньшими V_i , уже не могут эффективно образовывать Ps. Они могут либо аннигилировать при упругих столкновениях, либо образовать связанную квазиатомную систему e^+H . Энергия связи позитрона с атомом Н составляет величину порядка 0,29 эВ, а время жизни позитрона относительно аннигиляции $\tau_{e^+H} = 2,42 \cdot 10^{-10}$ с [11,12]. Однако система e^+H динамически не стабильна в отношении выброса позитрона. В этом направлении необходимы более точные теоретические расчеты.

Несомненно, что связанные позитрон-атомные и позитрон-молекулярные системы играют важную роль в процессах взаимодействия позитронов в космической плазме. Для выяснения особенностей процессов взаимодействия позитронов с атомами и молекулами кос-

мической плазмы особая роль принадлежит исследованию связанных состояний позитронов в многоэлектронных системах. Знать свойства таких состояний необходимо как для изучения механизмов аннигиляции, так и для описания элементарных процессов с участием позитронов в космической плазме. Особая роль в космической плазме несомненно принадлежит связанным состояниям позитрона на атомах водорода и отрицательных ионах водорода, как наиболее значимых в плазме [1,14,16], а также на других атомах и отрицательных ионах и частицах пыли [17,18], входящих в ее состав. Ниже рассматривается проблема позитронсо-держащих атомных систем в космической плазме в рамках метода Хартри-Фока [19] с полным самосогласованием, примененная ранее для исследования таких систем в ионных кристаллах [8-12].

1 Уравнения Хартри-Фока с полным самосогласованием для позитронсодержащих атомных систем

Волновую функцию системы, состоящей из m -электронного атома (отрицательного иона) и связанных с ними позитрона, выбираем в виде

$$\Psi(q_1 / q_2) = \chi_t(r_0)(k!)^{-1/2} \sum_p (-)^p \prod_i^k \varphi_i(P_{q_i}) [m-k!]^{-1/2} \sum_p (-)^p \prod_i^{m-k} \varphi_i(P_{q_2}), \quad (3)$$

где q_1 – совокупность пространственных координат k - электронов с одной ориентацией спина, q_2 - остальных $m-k$ электронов с противоположной ориентацией спина; P - оператор перестановки электронов; φ_i – одноэлектронные, а χ_t – однопозитронная координатные волновые функции системы; i и t заменяют набор квантовых чисел n, l, m . Заметим, что классификации однопозитронных и одноэлектронных состояний в системе независимы, т.е. могут принимать все значения начиная с $n = 1$ и $l = 1$

Представленная таким образом волновая функция системы антисимметрична относительно перестановок любой пары электронов с одной ориентацией спина. Наложение условий симметрии относительно перестановок электрона и позитрона не имеет смысла, так как гамильтониан системы несимметричен относительно перестановки этих частиц.

Принимая во внимание, что одноэлектронные функции ортонормированы, а однопозитронная нормирована на единицу, из условия минимума энергии получаем систему уравнений Хартри-Фока

$$2[H^-(\bar{r}) + V(\bar{r}) - U(\bar{r})]\varphi_p(\bar{r}) - \int \frac{\rho^{(1)}(\bar{r}', \bar{r}) + \rho^{(2)}(\bar{r}', \bar{r})}{|\bar{r} - \bar{r}'|} \varphi_p(\bar{r}') d\bar{r}' = \sum_{i=1}^{m-k} \lambda_{p_i} \varphi_i(\bar{r}); p = 1, 2, \dots, k, \quad (4a)$$

$$[H^-(\bar{r}) + V(\bar{r}) - U(\bar{r})]\varphi_p(\bar{r}) - \int \frac{\rho^{(2)}(\bar{r}', \bar{r})}{|\bar{r} - \bar{r}'|} \varphi_p(\bar{r}') d\bar{r}' = \sum_{i=1}^{m-k} \lambda_{p_i} \varphi_i(\bar{r}); p = k+1, k+2, \dots, m-k, \quad (4б)$$

$$[H^+(\bar{r}) - V(\bar{r})]\chi_k(\bar{r}) = \mu_k \chi_k(\bar{r}), \quad (4в)$$

где

$$H^\mp = -\frac{1}{2} \nabla^2 \mp \frac{Z}{r} \quad (5)$$

- операторы кинетической и потенциальной энергии в поле ядра, электрона и позитрона соответственно;

$$V(\bar{r})_+ = \int \frac{\rho^{(1)}(\bar{r}', \bar{r}') + \rho^{(2)}(\bar{r}', \bar{r}')}{|\bar{r} - \bar{r}'|} \varphi_p(\bar{r}') d\bar{r}' \quad (6)$$

- оператор электростатического взаимодействия с электронами;

$$U(\bar{r}) = \int \frac{\chi^2(\bar{r}')}{|\bar{r} - \bar{r}'|} d\bar{r}' \quad (7)$$

- оператор электростатического взаимодействия электронов с позитроном; $\rho^{(1)}(\bar{r}, \bar{r}')$ – зарядовая плотность, соответствующая электронам с одной ориентацией спина, а $\rho^{(2)}(\bar{r}, \bar{r}')$ – с противоположной; $\chi^2(\bar{r}')$ – пространственная плотность заряда позитрона;

$$\rho^{(1)}(\bar{r}', \bar{r}) = \sum_{p=1}^k \bar{\varphi}_p(\bar{r}') \bar{\varphi}_p(\bar{r}), \quad (8a)$$

$$\rho^{(2)}(\bar{r}', \bar{r}) = \sum_{p=1}^{m-k} \bar{\varphi}_p(\bar{r}') \bar{\varphi}_p(\bar{r}) \quad (8b)$$

Смешанные плотности, соответствующие обмену между электронами; λ_{p_i} и μ_k - множители Лагранжа для электронов и позитрона, отвечающие условиям ортогональности и нормировки одноэлектронных волновых функций и условию нормировки однопозитронной волновой функции соответственно.

Полученная система (4а-в) отличается от обычной системы уравнений Хартри-Фока для (m+1)-электронного атома, во-первых, знаком членов, соответствующих взаимодействию позитрона с остальными членами системы, во-вторых, отсутствием обмена между позитроном и электронами. Учет обмена между этими частицами выходит за рамки нерелятивистского рассмотрения [8-10], достаточного для решения поставленной задачи.

В конкретных задачах по методу Хартри-Фока для атомов с одним оптическим электроном обычно сначала интегрируется сначала система уравнений для атомного остова, а затем – уравнение для оптического в поле остова иона. В нашем случае позитрон аналогично оптическому электрону в поле атома (отрицательного иона) находится на периферии многоэлектронной системы. Тем не менее указанное приближение здесь не приемлемо, так как присутствие второго положительного заряда (позитрона) в системе значительно изменяет электронную структуру атома (иона). По этой причине в данном случае необходимо проведение интегрирования системы уравнений Хартри-Фока в строгой постановке (с полным самосогласованием), т.е. с последовательным учетом взаимодействия между всеми частицами, входящими в систему. Очевидно, что энергия связи позитрона с атомом (анионом) равна

$$\varepsilon_{e^+} = E_i - E = \tilde{E}_{\bar{o}\bar{o}}(N-2) - \tilde{E}_{\bar{o}\bar{o}}(N) \quad (9)$$

где $E_i \equiv \tilde{E}_{\bar{o}\bar{o}}(N-2)$ энергия аниона (атома), $E \equiv \tilde{E}_{\bar{o}\bar{o}}(N)$ полная энергия системы e^+ - анион (атом) [11,12].

Таким образом для вычисления энергии связи позитрона ε_{e^+} необходимо иметь не только полную энергию системы e^+ - анион (атом), но и рассчитанную по методу Хартри-Фока энергию атомного остатка, остающегося после аннигиляции пары.

Энергия связи системы e^+ - анион (атом) в отношении распада на атом позитрония и атомный остаток, т.е. сродство к позитронию в свою очередь равно [11,12]

$$\Delta \tilde{\varepsilon}_{\bar{o}\bar{o}}^{\bar{n}\bar{o}}[Ps(nL')] = \tilde{E}_{\bar{o}\bar{o}}(N-2) + E_{Ps}(nL') - \tilde{E}_{\bar{o}\bar{o}}(N), \quad (10)$$

где $\tilde{E}_{\dot{o}\dot{o}}(N), \tilde{E}_{\dot{o}\dot{o}}(N-2)$ - хартри-фоковская энергия системы e^+A^- и атома А соответственно, а $E_{Ps}(nL') = -1/4n^2$ - энергия позитрония в nL' состоянии, вычисляемая в борновском приближении.

2 Времена жизни позитронов в связанных состояниях и угловая корреляция аннигиляционных γ - квантов

Задача по аннигиляции позитронов тесно связана с проблемой позитронно-электронных состояний и процессов в космической плазме [1-3]. Одним из наиболее эффективных методов, применяемых для расчета процесса аннигиляции в многоэлектронных системах, является метод Хартри-Фока, так как различные процессы взаимодействия электронно-позитронного поля с полем излучения и внешним полем обычно рассматриваются в одноэлектронном приближении (см. работы Чжан Ли [20,21]).

Применим схему Чжан Ли для расчета стационарных состояний и аннигиляционных переходов системы позитрон+многоэлектронный атом (анион) и одного позитрона, где роль внешнего поля играет кулоновское поле неподвижного ядра атома, с которыми взаимодействуют электрон и позитрон.

Выше показано, что в приближении Хартри - Фока конфигурационная волновая функция системы из n электронов и позитрона записывается в виде произведения одноэлектронных волновых функций на позитронную волновую функцию $\chi_i(\bar{r}, \beta)$, удовлетворяющего условиям ортонормировки. Тогда вариационный принцип $\delta W = 0$, где W - математическое ожидание оператора $H_0 + H_1$ (H_0 - гамильтониан частиц во внешнем поле; H_1 - гамильтониан кулоновского взаимодействия частиц), в состоянии, имеющем n электронов и позитрон, при добавочных условиях ортонормировки приводит к уравнениям самосогласованного поля Хартри - Фока для системы из n электронов и одного позитрона во внешнем поле.

Найденные из уравнений Хартри - Фока одночастичные волновые функции используются для расчета в рамках квантовоэлектродинамической теории возмущений вероятности перехода в одну секунду

$$\omega = 2\pi |(\Omega_n, H', \Omega_0)|^2 \rho_n, \quad (11)$$

где Ω_0 и Ω_n - векторы состояний, включающие $\varphi_i(r_j, \alpha_j)$ и $\chi_i(\bar{r}, \beta)$ и описывающие соответственно начальное и конечное состояние; ρ_n - плотность состояний.

Для наиболее вероятного процесса второго порядка теории возмущений вероятность двухквантовой аннигиляции позитрона, просуммированная по различным состояниям электронов, усредненная по спинам начального состояния и просуммированная по поляризациям излучаемых фотонов, имеет вид [10]

$$\omega(\bar{k}) = \pi r_0^2 c \sum_{i=1}^n \left| \int \exp(-i\bar{k}\bar{r}) \varphi_i(\bar{r}) \chi_i(\bar{r}) d\bar{r} \right|^2 = \pi r_0^2 c \rho(\bar{p}) = \pi r_0^2 c \sum_i \rho_i(\bar{p}). \quad (12)$$

Здесь интегрирование проводится по всему объему квазиатома позитрон-анион; $\bar{k} = \bar{k}_1 + \bar{k}_2$ - суммарный волновой вектор аннигилирующей пары.

Исследования показывают, что в кристалле величина $\rho(\bar{p})$ или $\rho(\bar{k})$ равна

$$\rho(\bar{p}') = \sum_{nlm} \left(\int d\bar{r} \exp(-i\bar{k}\bar{r}) \psi_{nlm} \chi_t \right)^2. \quad (13)$$

Здесь суммирование проводится по всем $\langle nlm \rangle$ состояниям электронов квазиатома с квантовыми числами nlm .

Позитроны, принимающие участие в процессе аннигиляции, предварительно термализуются. Вследствие этого, в относительном движении электронно-позитронной пары будет доминировать движение электронов вещества и доплеровский сдвиг будет определяться особенностью электронного окружения вокруг места аннигиляции позитрона. Для нерелятивистских электронов доплеровский сдвиг аннигиляционных γ квантов дается выражением

$$\delta E = cp_i/2. \quad (14)$$

Здесь p_i - компонента импульса пары в направлении распространения гамма-квантов. Для типичных значений энергий электронов в несколько эВ и термализованного позитрона получаем $\delta E \cong 1,2$ эВ. В экспериментах, где определяются энергии ряда определенных аннигиляционных фотонов, доплеровский сдвиг индивидуальной аннигиляционной линии будет приводить к уширению аннигиляционного фотопика (см. рис.2 в [5]), которое обычно называется доплеровским уширением.

Хотя, в принципе, возможно разложение аннигиляционного фотопика с целью определения импульсного распределения, обычно используют простой параметр формы, характеризующий фотопик. Обычно используются два параметра: S (для формы) и W (для крыльев кривых). Определение этих параметров схематически представлено на рис.3 в [5]. Параметр S определяется как отношение числа счетов (т.е. площади) в центральной области спектрального пика к общему числу счетов (площади) в пике, а W определяется как отношение счетов в области крыльев к общей скорости в пике. S и W параметры определяют форму одномерного импульсного распределения

$$S, W = \sum_i \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_x dp_y \rho(\bar{p}) / \sum_{tot} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_x dp_y \rho(\bar{p}), \quad (15)$$

где Σ_i - определенное значение энергетического окна для S и W по определению. S и W параметры имеют простую связь с доплеровским уширением: например, если наблюдается узкий аннигиляционный пик, то это означает, что аннигиляция идет в основном на медленных электронах, а если S параметр велик, то на быстрых. Таким образом, аннигиляция валентных электронов отражается в S параметре, а аннигиляция с электронами ионного остова - в W параметре.

Использование простых параметров, таких как S и W, дает исчерпывающую информацию о дефектах типа объемов открытого типа и внутренних электрических полях. Абсолютные величины S и W параметров имеют малую физическую значимость, так как они определяются положением окон, выбранных по определению. Относительные изменения этих параметров позволяют получать информацию об участках аннигиляции. Вследствие этого, S и W параметры обычно нормируются относительно величины, свойственной «бездефектным участкам». Нормированные величины могут быть сравнены для различных участков и различных экспериментальных установок. Так как параметры доплеровского уширения измеряются очень быстро, то они часто используются для определения сравнительной концентрации определенных атомов в участках.

Время жизни позитрона в квазиатоме определяется выражением

$$\tau = W^{-1}, \quad W = \sum_k \omega(\bar{k}). \quad (16)$$

УРАФ определяется относительной вероятностью

$$P(\bar{k}) = \omega(\bar{k}) / \omega(0). \quad (17)$$

В экспериментах, однако, функция $P(\bar{k})$ не наблюдается, так как измеряется обычно относительная вероятность, зависящая от z-компоненты импульса $\bar{p} = \hbar\bar{k}$

$$P(k_z) = I(k_z) / I(0); \quad (18)$$

$$I(k_z) = \iint P(\bar{k}) dk_x dk_y. \quad (19)$$

Импульсное распределение центров масс аннигилирующих электронно-позитронных пар определяется выражением

$$N(p) = p^2 \int \rho(\bar{p}) d\Omega = p^2 \sum_i \int \rho_i(\bar{p}) d\Omega_i. \quad (20)$$

Для позитрона, связанного с атомом или отрицательным ионом, время жизни позитронного состояния по отношению к двухквантовой аннигиляции, усредненное по начальным спиновым состояниям позитрона и электронов равно [8-10,20,21]

$$\tau = \frac{1}{\sum_k \omega(\bar{k})} = \frac{1}{\pi r_0^2 c \rho_0} \frac{1}{K} \frac{\bar{\rho}_0}{\rho}, \text{ с} \quad (21)$$

Здесь r_0 – классический радиус электрона, c – скорость света;

$$\bar{\rho} = \sum_{nlm} \int \bar{\varphi}_{nlm}(\bar{r}) \chi^2(\bar{r}) d\bar{r} \quad (22)$$

- электронная плотность, усредненная по положению позитрона в отрицательном ионе (атоме); $\bar{\rho}_0 = (1/8)\pi a_0^3$ – электронная плотность в нуле в атоме позитрония, усредненная по начальным спиновым состояниям, а $\pi r_0^2 c \bar{\rho}_0$ – скорость аннигиляции в позитронии; a_0 – радиус первой борновской орбиты;

$$K = \left| \int \bar{\Psi}' \Psi(d\tau) \right|^2, (d\tau) = d\bar{r}_1 d\bar{r}_2 \dots d\bar{r}_{m-1}, \quad (23)$$

K - фактор, учитывающий изменение волновых функций электронов, не участвующих в аннигиляции; $\bar{\Psi}'$ - полная волновая функция атомного остатка, остающегося после аннигиляции пары в системе e^+ -анион (атом); Ψ - волновая функция атомного остова в отрицательном ионе, деформированном позитроном.

Представляет также интерес среднее время жизни в дискретном спектре систем позитрон-анион. Время жизни связанного состояния n по отношению к радиационному переходу равно [5]

$$t_n = \frac{1}{\sum_{E_{n'} < E_n} A_{n'n}}, \quad (24)$$

где

$$A_{n'n} = \frac{4}{3} \alpha^3 \omega^3 |\bar{r}_{n'n}|^2 \quad (\text{ат. ед}) \quad (25)$$

вероятность радиационного перехода из состояния n в состояние n' , $|\bar{r}_{n'n}|$ - матричный элемент электрического дипольного момента, $\omega = E_n - E_{n'}$ (а.е.).

3 Система e^+H^-

Ранее нами было проведено [8-10] численное решение системы e^+H^- , состоящей из иона водорода H^- и связанного с ним позитрона в основном и ряде возбужденных состояний $1s^2(1s)$, $1s^2(2s)$, $1s^2(2p)$, $1s^2(3s)$, $1s^2(3p)$, $1s^2(3d)$, $1s^2(4s)$, $1s^2(4p)$, $1s^2(4d)$, $1s^2(4f)$. (В скобках заключены позитронные состояния различных конфигурации $1s^2(nl)$).

Уравнения (2а-в) для радиальных одноэлектронных и однопозитронных волновых функций системы e^+H^- с конфигурацией $1s^2(nl)$ в этом случае записывали в виде

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} + F_0^{nl,nl} \right) f_{10} = \lambda_{10,10} f_{10}, \quad (26)$$

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - 2F_0^{10,10} \right) \chi_{nl} = \mu_{nl,nl} \chi_{nl}. \quad (27)$$

Здесь $f_{10}(r)$ и $\chi_{nl,nl}(r)$ - радиальные части одноэлектронной и однопозитронной волновых функций соответственно, удовлетворяющие следующим граничным условиям

$$f_{10}(r) = f_{10}(\infty) = 0; \quad \chi_{nl}(0) = \chi_{nl}(\infty) = 0, \quad (28)$$

$$F_0^{10,10} = \int_0^\infty f_{10}^2(r') K_0(r, r') dr'; \quad F_0^{nl,nl} = \int_0^\infty \chi_{nl}^2(r') K_0(r, r') dr' \quad (29)$$

$$K_0(r, r') = 1/r \quad \text{при } r' \leq r; \quad K_0(r, r') = 1/r' \quad \text{при } r' \geq r; \quad (30)$$

$\lambda_{10,10}$ и $\mu_{nl,nl}$ - множители Лагранжа, отвечающие условиям

$$\int_0^\infty f_{10}^2(r) dr = 1; \quad \int_0^\infty \chi_{nl}^2(r) dr = 1. \quad (31)$$

Основные результаты численного решения системы уравнений (26), (27) с учетом граничных условий (28), (31) приведены в [10] и в табл.1, рис.1,2. Ниже нами приведены уточненные посредством численного интегрирования значения параметров связи и аннигиляционных характеристик в связи с допущенными рядом неточностей в [10].

Собственные значения $\lambda_{10,10}$ и $\mu_{nl,nl}$ приведены в табл.1. Там же даны величины полной энергии E системы e^+H^- и отрицательного иона водорода $E_{H^-} \approx 0,5$ а.е. и значения энергии связи позитрона ε_{e^+} в эВ ($\varepsilon_{e^+} = E_{H^-} - E$). Величина полной энергии вычислялась по формуле

$$E = \int_0^{\infty} \left(\frac{df_{10}}{dr} \right)^2 dr + \frac{1}{2} \left\{ \int_0^{\infty} \left(\frac{d\chi_{nl}}{dr} \right)^2 dr + l(l+1) \int_0^{\infty} \chi_{nl}^2 \frac{1}{r^2} dr \right\} - 2 \int_0^{\infty} f_{10}^2 \frac{1}{r} dr + \int_0^{\infty} \chi_{nl}^2 \frac{1}{r} dr + \int_0^{\infty} F_0^{10,10} f_{10}^2 \frac{1}{r} dr - 2 \int_0^{\infty} F_0^{nl,nl} f_{10} \frac{1}{r} dr = K_{10}^- + K_{nl}^+ - 2V_{10}^- + V_{nl}^+ + U_{10,10} - 2U_{10,nl} \quad (32)$$

Таблица 1 Энергия системы e^+H^- в основном и ряде возбужденных состояний. Энергия связи позитрона с отрицательным ионом водорода

Состояние	$-\lambda_{10,10}$	$-\mu_{nl,nl}$	$-E$, а.е.	ε_p , эВ
$1s^2(1s)$	0,2988	0,1910	0,6675	4,57
$1s^2(2p)$	0,2144	0,1033	0,5895	2,72
$1s^2(2s)$	0,1592	0,0705	0,5561	1,53
$1s^2(3d)$	0,1542	0,0543	0,5471	1,29
$1s^2(3p)$	0,1362	0,0486	0,5423	1,15
$1s^2(3s)$	0,1160	0,0376	0,5333	0,91
$1s^2(4p)$	0,1027	0,0282	0,5253	0,69
$1s^2(4s)$	0,0929	0,0231	0,5211	0,58
$1s^2(4d)$	0,1044	0,0305	0,5185	0,51
$1s^2(4f)$	0,1081	0,0312	0,5190	0,52
$1s^2(6s)$	0,1057	0,0106	0,5031	0,085
$1s^2(H^-)$	0,0927		0,4885	$\sim 0,75^*$

*Энергия связи электрона в ионе (H^-).

4 Вероятности аннигиляционных и радиационных переходов в системе e^+H^-

Представляет интерес расчет вероятностей захвата свободных позитронов на уровни энергии системы e^+H^- . Согласно [10], эти вероятности оцениваются по формуле

$$W_p = 4,3 Av \text{ (с}^{-1}\text{)}, \quad (33)$$

$$A = \frac{(\varepsilon_0 - \mu_{nl})^3}{\varepsilon_0} |r_{nl,\varepsilon_0(l\pm 1)}|^2. \quad (34)$$

Здесь v - скорость, а ε - энергия свободного позитрона; для термализованного позитрона в веществе $\varepsilon = 9,16 \cdot 10^{-4}$ а.е., $|r_{nl,\varepsilon_0(l\pm 1)}|^2$ - матричный элемент электрического дипольного момента, в котором одна из однопозитронных функций принадлежит непрерывному спектру.

Те же волновые функции непрерывного спектра использовались для вычисления скоростей двухфотонной аннигиляции свободных позитронов в поле отрицательных ионов водорода

$$W_A = 1,5 \cdot 10^{-14} \bar{\rho} KN, \text{ (с}^{-1}\text{)} \quad (35)$$

$$\bar{\rho} = \int_0^{\infty} \frac{f_{10}^2(r) \chi_{nl}^2}{r^2} dr, \quad (36)$$

где N - число отрицательных ионов водорода в единице объема среды, для гидрида лития ($N = 6,062 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$).

Скорость аннигиляции связанных с H^- позитронов LiH вычисляли по формуле

$$W_A = 0,402 \cdot 10^{10} \frac{\bar{\rho}}{\rho_0} K \text{ (с}^{-1}\text{)}, \quad (37)$$

где

$$\bar{\rho} = \int_0^\infty \frac{f_{10}^2(r) \chi_{nl}^2}{r^2} dr. \quad (38)$$

Т.о. скорость аннигиляции в связанных состояниях не зависит от плотности среды.

Полученные значения вероятностей захвата и скоростей аннигиляции связанных и свободных позитронов в поле H^- представлены в табл.2.

Таблица 2 Скорости аннигиляции связанных и свободных позитронов в поле H^- и вероятности захвата термализованных позитронов отрицательным ионом водорода

Состояние	К	$\bar{\rho}, 10^2 \text{ а.е.}$	$W_A, 10^8 \text{ с}^{-1}$	$r_{\varepsilon_0 l \rightarrow n' l'}$	$W_p, 10^8 \text{ с}^{-1}$
$1s^2(1s)$	0,91	0,24	2,2	0,85	0,24
$1s^2(2p)$	0,88	0,09	0,757	15,94	3,30
$1s^2(2s)$	0,88	0,046	0,422	29,48	49,6
$1s^2(3d)$	0,88	0,0114	0,124	20,68	3,30
$1s^2(3p)$	0,89	0,022	0,201	173,5	170
$1s^2(3s)$	0,89	0,016	0,160	104,4	30,2
$1s^2(4p)$				538,5	370
$1s^2(4s)$	0,89	0,008	0,069		
$1s^2(4d)$	0,89	0,008	0,072		
$1s^2(4f)$	0,89	0,0085	0,077		
$1s^2(6s)$	0,90	0,034	0,315		
$1s^2(\varepsilon_0 s)$	-	0,128	0,011		
$1s^2(\varepsilon_0 p)$	-	0,00066	0,0001		

*В табл. 3 приведены уточненные данные величин $\bar{\rho}$, $I_{10,El}$ и W_A , рассчитанные на основе волновых функций, приведенных в [16,26].

В системе e^+H^- , когда она находится в возбужденных состояниях, наряду с аннигиляцией связанных позитронов могут происходить радиационные переходы на нижележащие уровни.

Вероятности радиационных переходов позитрона с каждого подуровня s, p, d - состояний с $n = 2, 3, 4$ во все более низкие состояния с $n', l \pm 1$ рассчитывались по формулам

$$A_{n,l;n'l-1} = 2,13 \cdot 10^{10} \frac{l}{2l+1} \omega^3 |r_{n,l;n'l-1}|^2, \text{ с}^{-1} \quad (39)$$

$$A_{n,l;n'l+1} = 2,13 \cdot 10^{10} \frac{l}{2l+1} \omega^3 |r_{n,l;n'l+1}|^2, \text{ с}^{-1} \quad (40)$$

где $|r_{n,l;n'l}|^2$ - матричный элемент электрического дипольного момента, а $\omega = \varepsilon_{nl} - \varepsilon_{n'l'}$. Результаты приведены в табл.3.

Таблица 3 Вероятности радиационных переходов в системе e^+H^- в (10^8 с^{-1})

Состояние		1	2	3	4	Константа распада
начальное	конечное					
$2p$	ns	0,565 (4,0918)	-	-	-	0,565

2s	np	-	0,067 (-5,015)	-	-	0,067
2	Среднее	0,425	-	-	-	0,425
3d	np	-	-	-	-	-
3p	nd	-	-	-	-	-
3p	ns	0,0567 (0,7182)	0,0184 (9,9128)	-	-	0,0751
3s	np	-	-	0,0074 (11,7419)	-	-
3	Среднее	-	-	-	-	-
4f	nd	-	-	0,234 (10,7299)	0,003 (-15,608)	370
4d	nf	-89	-	-	-	-
4d	np	-	-	0,141 (11,0757)	-	-
4p	nd	-	-	-	0,005 (-20,18)	-
4p	ns	0,023 (0,3416)	0,005 (1,5478)	0,007 (17,132)	-	-
4s	np	-	-	-	0,002 (-20,804)	-
4	Среднее	-	-	-	-	-

Примечание. В скобках приведены величины интегралов перехода.

5 Угловое распределение аннигиляционных фотонов в плазме и гидридах щелочных металлов

УРАФ рассчитывалась по формулам (17)-(19). Можно показать, что вероятность аннигиляции в единицу времени, усредненная по спинам начальных состояний двух электронов и позитрона в системе e^+H^- и просуммированная по поляризациям излучаемых фотонов, имеет вид

$$\omega(\bar{k}) = 2\pi r_0^2 c \left| \int e^{-i\bar{k}\bar{r}} \varphi(\bar{r}) \chi(\bar{r}) d\bar{r} \right|^2. \quad (41)$$

В свою очередь относительная вероятность, зависящую от z - компоненты вектора \bar{k} дается выражением

$$P_{n,l}(k_z) = \frac{\int_{k_z|0}^{\infty} \int_0^{\infty} f_{10}(r) \chi_{nl}(r) j_l(kr) \Big| k dk}{\int_0^{\infty} \int_0^{\infty} f_{10}(r) \chi_{nl}(r) j_l(kr) \Big| k dk}. \quad (42)$$

Здесь $j_l(kr)$ - сферическая функция Бесселя, равная

$$j_l(kr) = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+1/2}(kr), \quad (43)$$

где $J_{l+1/2}(kr)$ - функция Бесселя с полуцелыми индексами.

Вычисленные кривые угловой корреляции $P_{nl}(k_z)$, соответствующие аннигиляции с уровней $1s^2(1s), 1s^2(2s)$, представлены на рис.1 работы [10], которые хорошо согласуются с экспериментальной кривой для LiH [29].

6 Обсуждение результатов

В краткой форме проведем обсуждение полученных результатов в табл.1,2 и 3. Отметим, что для этого в табл.1 приводятся ряд величин энергий, вычисленные в ряде других работ [22-33]. В последнем столбце даны значения энергии связи позитрона с H^- в электрон-вольтах ($\varepsilon_{e^+} = E_{H^-} - E$). Полученные результаты показывают, что система H^- стабильна в отношении распада на позитрон и H^- как в основном, так и в возбужденных состояниях. В

свою очередь следует отметить, что система e^+H^- , рассчитанная нами в приближении метода Хартри-Фока, динамически нестабильна в отношении распада на атом водорода и атом позитрония. Однако, расчетами в рамках вариационных методов [26-28] было установлено, что полная энергия системы E , сродство (энергия диссоциации) к позитрону ε_{e^+} ион H^- и позитронию E_{Ps} атома H составляют величины $E = -0,7868$ а.е., $\varepsilon_{e^+} \approx 7,0296$ эВ, $E_{Ps} = 1.001$ эВ соответственно. Время жизни позитрона относительно двухквантовой аннигиляции в основном состоянии системы e^+H^- составляет величину $\tau = 4,3 \cdot 10^{-10}$ с. Поэтому отметим, что в настоящее время к строго стабильным (устойчивым к выбросу позитрона и позитрония, так что единственным каналом распада является канал аннигиляции) можно отнести лишь гидрид позитрония e^+H^- .

Полученные значения вероятности захвата и скоростей аннигиляции связанных и свободных термализованных позитронов в поле H^- представлены в табл.2. Как видим, вероятность аннигиляции свободных позитронов пренебрежимо мала по сравнению с вероятностями двухфотонной аннигиляции связанных позитронов. Этот вывод также вероятно применим и к космической плазме, содержащей большие концентрации ионов H^- .

Следует отметить одно важное обстоятельство: вероятности радиационных захватов термализованных позитронов в возбужденные состояния системы e^+H^- на порядок и более превышают вероятность радиационного захвата позитронов в основное состояние e^+H^- . Особенно велики эти вероятности в высоковозбужденные состояния системы e^+H^- . Это говорило бы о том, что именно эти состояния e^+H^- и являются преувалирующими в космической плазме. Однако при этом следует иметь в виду, что энергии связи позитрона для этих состояний резко уменьшаются. При этом система e^+H^- , согласно (10), становится динамически нестабильной в отношении распада на атом позитрония и атом водорода. Вариационные расчеты системы e^+H^- [11,12,25-28,32,33] подтверждают этот вывод. Таким образом, образование позитрония в космической плазме с большой концентрацией ионов H^- может происходить посредством образования квазистабильных высоковозбужденных состояний позитрона в системе e^+H^- и последующего ее распада на атом водорода и позитроний. В такой космической плазме возможен практически 100 % выход позитрония, о чем говорят экспериментальные данные космической лаборатории Интеграл [14].

В системе e^+H^- , когда она находится в возбужденных состояниях, наряду с аннигиляцией связанных позитронов могут происходить радиационные переходы на нижележащие уровни (см.табл.3). Сравнение полученных значений скоростей аннигиляции связанных позитронов и вероятностей радиационных переходов для тех же уровней показывает, что на всех рассмотренных уровнях с $n > 2$ практически осуществляются лишь аннигиляция. Для уровней $n = 2$ процессы аннигиляционных и радиационных переходов конкурируют между собой. Действительно из данных табл.2 видим, что по мере перехода от основного к возбужденным состояниям скорость аннигиляции резко падает, поэтому короткоживущую компоненту дает аннигиляция с первых двух уровней $n = 1$ и $n = 2$.

Заключение

Из данных расчетов следует, что системы e^+H^- в основном состоянии в космической плазме стабильны в отношении распада $e^+H^- \rightarrow H^- + e^+$ и $e^+H^- \rightarrow H + Ps(e^-e^+)$. Следовательно, системы e^+H^- в основном состоянии в плазме динамически стабильны в принятом приближении свободного атома. Время жизни позитрона относительно двухквантовой аннигиляции в основном состоянии системы e^+H^- составляет величину $\tau = 4,3 \cdot 10^{-10}$ с. Таким образом, аннигиляция связанных позитронов на ионах космической плазмы H^- вносит вклад во временных спектрах аннигиляции в компоненту со временем жизни $\tau = 4,3 \cdot 10^{-10}$ с и резко укорачивает время жизни по сравнению со временем жизни свободных квазитермализован-

ных позитронов, составляющих величины порядка $3 \cdot 10^6$ лет [3], что приводит к уменьшению интенсивности этой компоненты в спектрах аннигиляции. Кроме того, сделан вывод, что образование позитрония в космической плазме с большой концентрацией ионов H^- может происходить посредством образования квазистабильных высоковозбужденных состояний позитрона в системе e^+H^- и последующего ее распада на атом водорода и позитроний. В такой космической плазме возможен практически 100 % выход позитрония, о чем говорят экспериментальные данные космической лаборатории Интеграл [14].

Литература

1. Н.А.Власов. Антивещество. М.: Атомиздат. 1968.
2. Х.Альвен. Космическая плазма. М.: Мир, 1983.
3. Прокопьев Е.П. Позитронная астрофизика и позитронные состояния в галактической среде с низкой плотностью // *Астрономический журнал*. 1994, т.70, №3, с.906-908.
4. В.Л.Гинзбург и др. Астрофизика космических лучей. Под. ред. В.Л.Гинзбурга. М.: Наука. 1990. 496 с.
5. Гольданский В.И. Физическая химия позитрона и позитрония. М.: Наука, 1968. 253 с.
6. Арифов У.А., Арифов П.У. Физика медленных позитронов. Ташкент:ФАН, 1971.244 с.
7. S. Tao et al. // *Proc. Phys. Soc.* 1963. V.81. P.1091.
8. В.И.Гольданский, А.В.Иванова, Е.П.Прокопьев. Об аннигиляции позитронов в гидридах щелочных металлов // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 1964. Т.47. Вып.8. С.659-666.
9. А.В.Иванова, Е.П. Прокопьев // *Теоретическая и экспериментальная химия*. 1967. Т.3. Вып.4. С.471-477.
10. В.И.Гольданский, А.В.Иванова, Е.П.Прокопьев. Применение метода Хартри-Фока к задачам аннигиляции позитронов в конденсированных средах ионного типа // *В кн.: Ядерная химия М.: Наука, 1965. С.249-267.*
11. Арифов П.У. и др. Квантовые свойства атомов и ионов и позитронная диагностика. Ташкент: ФАН, 1975. 242 с.
12. Арифов П.У. и др. Позитронсодержащие системы и позитронная диагностика. Ташкент: ФАН, 1978. 192 с.
13. *Ore. Univ. Bergen Arbook*. 1949. №9; №12.
14. Е.М.Чуразов, Р.А.Сюняев, С.Ю.Сазонов, М.Г.Ревнивцев, Д.А.Варшалович. Аннигиляционное излучение центральной зоны Галактики: результаты обсерватории ИНТЕГРАЛ // *УФН*, Т.176, №3, с.334-339.
15. J.Wheeler // *Ann. N. Y. Acad. Sci.* 1946. Vol.48. P.219.
16. C.C.Ting et al. *Physics Reports*. 2002. Vol.366/6. P.331-404; *Phys. Lett.* 1999. Vol.B461. P.387-396; 2000. Vol.B472. P.215-226; 2000. Vol.B484. P.10-22; 2000. Vol.B490. P.27-35; 2000. Vol.B494. P.193-202.
17. С.И.Сыроватский. О химическом составе и происхождении галактических космических лучей // *В кн.: Ядерная химия М.: Наука, 1965. С.74-95.*
18. В.Л.Гинзбург, С.И.Сыроватский. Происхождение космических лучей. М.: Изд-во АН СССР, 1963.
19. V.Fock // *Zs. f. Phys.* 1930. Vol.61. P.126.
20. Чжан Ли // *ЖЭТФ*. 1957. Т.33. С.365; *Вестн. ЛГУ, сер. физ.-хим.* 1958. №4. С.160.
21. Чжан Ли // *Вестн. ЛГУ, сер. физ.-хим.* 1958. №4. С.160.
22. В.П.Шмелев. Автореф. канд. дисс. М.: МГУ, 1959.
23. Дин Ван Хоанг, ДАН БССР // 1964. Т.8. С717; 1965. Т.9.. С.152; *ЖЭТФ*. 1965. Т.49. С.630; *ТЭХ*. 1966. Т.2. С.630.

24. А.А.Ткаченко // Вестн. ЛГУ, сер. физ. – хим. 1958. №22. С.167.
25. S.Neamten, G.Darewich, G.Oczkowski // Phys. Rev. 1962.Vol.126. P.193.
26. O.Ludwig, R.Parr // Theor. chim. acta. 1966. Vol.5. P.440.
27. C.Lebeda, D.Schrader // Phys. Rev. 1969.Vol.178. P.24.
28. D.Schrader, T.Peterssen // Phys. Rev. 1971.Vol.A3. P.61.
29. L.Simons // Soc. Sci. Fennica, Comment. Phys. – Math. // 1948. Vol.14. P.2; 1949. Vol.14. P.12; 1949. Vol.14. P.12.
30. A.Stewart, R.March // Phys. Rev. 1961.Vol.122. P.75.
31. T.C. Griffith and G.R. Heyland // Phys. Repts. 1978. Vol.39. №3. P.169.
32. C.M.Surko, G.F.Gribakin, S.J.Buckman // J.Phys. B : At. Mol. Phys. 2005. Vol.38. P.R57.
33. M.C. Surko, M.Leventhal and A. Passner // Phys. Rev. Lett. 1989. Vol.62. №8. P.901.

ПОЗИТРОНДАРДЫҢ ҒАРЫШТЫҚ ПЛАЗМАНЫҢ АТОМДАРЫНДАҒЫ АННИГИЛЯЦИЯСЫ

Е.П. Светлов-Прокопьев

H^- иондардың концентрациясы көп, ғарыштық плазмада позитронийдің пайда болуы e^+H^- жүйесінде позитронның квазитұрақты жоғары қоздырылған күйі арқылы пайда болатыны көрсетілген. Мұндай ғарыштық плазмада позитронийдің 100 % болуы мүмкін, бұл туралы Интеграл лабораториясының эксперименттік деректеріне сүйеніп тұжырымдауға болады.

THE ANNIGILATION OF POSITRONS ON ATOMS OF SPACE PLASMA

E.P. Svetlov

It is shown, that formation a positron in space plasma with the big concentration of ions H^- can occur by means of formation высоковозбужденных conditions of a positron in system e^+H^- and its subsequent disintegration on atom of hydrogen and a positron. In such space plasma the output a positron about what speak experimental data of space laboratory Integral is possible practically 100 %.