

II-O-1.8

KHẢO SÁT NĂNG LƯỢNG TƯƠNG QUAN ELECTRON – POSITRON TRONG ZnO BẰNG PHƯƠNG PHÁP VQMC VỚI SỰ HIỆU CHỈNH HÀM SÓNG POSITRON

Châu Văn Tạo¹, Trịnh Hoa Lăng¹, Nguyễn Anh Tuấn², Lê Hoàng Chiến¹

¹Khoa Vật lý - Vật lý Kỹ thuật, Trường ĐH Khoa học Tự nhiên - ĐHQG Tp.HCM

²Trung tâm Nghiên cứu và Triển khai Công nghệ Bức xạ

Tóm tắt

Trong bài báo này, chúng tôi tính năng lượng tương quan electron – positron trong phân tử kẽm oxit (ZnO), trong đó giả thiết rằng positron liên kết với các electron thuộc phân lớp ngoài cùng của các nguyên tử kẽm và oxi trước khi nó hủy với một trong các electron đó. Với việc sử dụng phương pháp biến phân Monte - Carlo lượng tử (VQMC) [2], đồng thời hiệu chỉnh hàm sóng của positron theo nguyên lý chồng chất nhiều trạng thái, năng lượng tương quan electron–positron được tính toán và nó có giá trị là $E_c^{e-p} = -9,3 \pm 1,1$ eV. Kết quả này (-9,3 eV) gần với các kết quả của một số chất được tính bởi các phương pháp khác trong [3] hơn so với trường hợp trước khi hiệu chỉnh [1].

Từ khóa: Positron, biến phân Monte - Carlo lượng tử.

CALCULATING THE POSITRON – ELECTRON CORRELATION ENERGY IN ZnO BY USING VQMC METHOD WITH THE MODIFIED SINGLE WAVE FUNCTION FOR POSITRON

Chau Van Tao¹, Trinh Hoa Lang¹, Nguyen Anh Tuan², Le Hoang Chien¹

¹Faculty of Physics - Engineering Physics, University of Science - VNU HCMC

²Research and Development Center for Radiation Technology

Abstract

The ZnO – positron system is studied and its positron – electron correlation energy is estimated in its ground state. The positron binds with the outer shell electrons of Zinc and Oxygen to form the pseudo ZnO – positron molecule before it annihilates with one of these electrons. In this work, the single wave function for positron is modified according to the principle of linear superposition, and by using Variational Quantum Monte – Carlo method (VQMC) [2] the correlation energy of this system is estimated with the value $E_c^{e-p} = -9.3 \pm 1.1$ eV. It turns out that the value is closer to results estimated by other methods [3] than the value before modifying the wave function for positron [1].

Key words: Positron, Variational Quantum Monte – Carlo.