

## II-P-1.23

### TÍNH TỐC ĐỘ HỦY ELECTRON – POSITRON TRONG PHÂN TỬ TiO<sub>2</sub> VỚI HÀM SÓNG CÓ XẤP XỈ DẠNG SLATER

Châu Văn Tạo, Trịnh Hoa Lăng, Nguyễn Hữu Lộc, Lê Hoàng Chiến

Khoa Vật lý - Vật lý Kỹ thuật, Trường ĐH KHTN, ĐHQG-HCM

#### Tóm tắt

Tốc độ hủy và thời gian sống của positron trong phân tử TiO<sub>2</sub> được nghiên cứu và tính toán với giả thiết là positron liên kết với các electron ở lớp ngoài cùng nguyên tử Titan (Ti) và Oxi (O) trước khi nó hủy với một trong các electron đó. Trong quá trình tính toán, chúng tôi sử dụng xấp xỉ Slater để xây dựng hàm sóng của electron và positron, đồng thời áp dụng phương pháp biến phân Monte Carlo (VQMC) [7] để tìm trạng thái cơ bản của hệ. Trong bài báo này, hệ số tăng cường, tốc độ hủy và thời gian sống của positron được tính toán với các giá trị lần lượt là  $g_0 = 6.60$ ,  $G = 3.46 \cdot 10^9$  (s<sup>-1</sup>),  $t = 289$  ps. Kết quả là thời gian sống của positron là khá phù hợp khi so sánh với thực nghiệm [1]. Để hiệu chỉnh mô hình tính toán nhằm đạt kết quả chính xác hơn, chúng tôi sẽ tính toán tốc độ hủy của positron trong nhiều vật liệu khác nhau.

### THE POSITRON – ELECTRON ANNIHILATION IN TiO<sub>2</sub> CALCULATED WITH THE SLATER – TYPE ORBITALS

#### Abstract

Positron annihilation rate and life time are studied in the TiO<sub>2</sub> by assumption that positron binds with the outer shell electrons of Titanium and Oxygen to form the pseudo TiO<sub>2</sub> – positron molecule before it annihilates with one of these electrons. In this work, the Slater type orbitals and LCAO approximation are used to form electrons and positron wavefunctions in TiO<sub>2</sub>, and by using Variational Quantum Monte – Carlo method (VQMC) [7] the ground-state wavefunction of this system is determined. By this wavefunction, the enhancement factor, annihilation rate and life time of positron are estimated with the values  $g_0 = 6.60$ ,  $G = 3.46 \cdot 10^9$  (s<sup>-1</sup>),  $t = 289$  ps, respectively. The life time of this calculation is well agreement with the experimental result [1]. To confirm this legitimate approach, however, the further calculations of positron annihilation rate in the other materials have to be carried out in our next work.