

U ovom radu predstavljeni su rezultati Monte Karlo simulacija termalizacije roja pozitronijuma (Ps) u helijumu (He) i vodenoj pari. Ispitivana je vremenska evolucija energijskih i prostornih parametara roja i uticaj oblika preseka i početnih energijskih raspodela na njihov oblik. Pozitronska anihilaciona spektroskopija (PAS) i pozitronska emisiona tomografija (PET) jesu tehnike koje se zasnivaju na anihilaciji pozitronijuma u materijalima i tkivima. Dobijeni rezultati pokazuju da Monte Karlo tehnika daje dobro slaganje sa eksperimentalnim rezultatima i može dobro opisati ponašanje čestica pozitronijuma uključujući i energiju, vreme života čestice i trenutak i mesto anihilacije.

Pozitron se u prirodi javlja kao product β^+ -raspada radioaktivnih elemenata kao što su npr. ^{40}K ili ^{90}Sr . U laboratoriji se za ispitivanje osobina pozitrona koriste razne vrste trapova [1,2], koji omogućavaju upotrebu većeg broja čestica i istovremeno dozvoljavaju precizno podešavanje energije pozitrona za eksperiment.

Glavne primene pozitrona su pozitronska emisiona tomografija (PET – *Positron Emission Tomography*) i pozitronska anihilaciona spektroskopija (PAS – *Positron Annihilation Spectroscopy*). Obe tehnike svoj rad zasnivaju na detektovanju γ -fotona i lociranju mesta gde se dogodila anihilacija. U većini slučajeva, anihilacija se ne događa direktno između slobodnih elektrona i pozitrona. Najčešće pozitron i elektron formiraju pozitronijum (Ps), „egzotičan atom“ koji predstavlja vezano stanje elektrona i pozitrona.

Dakle, kako bismo opisali procese koji se dešavaju prilikom PET-skena ili PAS-spektroskopije nije dovoljno poznavati i pratiti samo osobine pozitrona. Potrebno nam je da na već postojeće alate koji prate pozitron [3,4] nadovežemo novi alat koji bi bio u stanju da prati pozitronijum od trenutka njegovog nastanka, do trenutka anihilacije. Osnovni problem u kreiranju takvog alata jeste nedostatak pouzdanih preseka za interakciju pozitronijuma sa česticama sredine.

Odkora su dostupni eksperimentalno određeni preseki za prenos impulsa u interakciji Ps–He na niskim energijama. Engbrecht i saradnici [5] merili su Doppler-ovo širenje zračenja nastalog anihilacijom pozitronijuma i određivali profil termalizacije (relaksacija energije roja čestica u vremenu) Ps u helijumu. Iz termalizacionog profila, na osnovu teorije koju su dali Nagashima i saradnici [6] određen je presek za prenos impulsa koji na niskim energijama ima jaku zavisnost od energije.

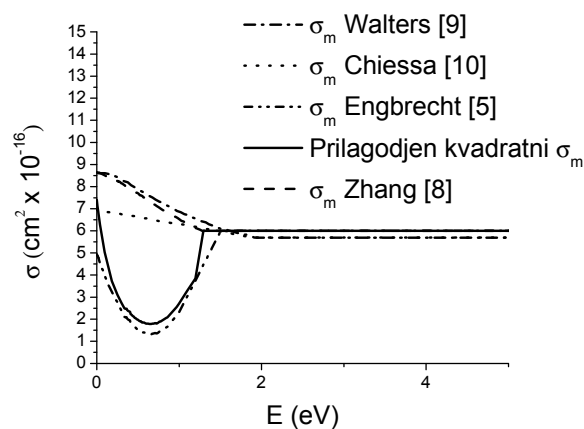
U ovom radu, koristeći temeljno testiran Monte Karlo kod [3,4,7], uporedili smo termalizacione profile za eksperimentalno određen presek za prenos impulsa

Ps–He i ranije dostupne teorijski određene preseke za helijum, i testirali koliko parametri kao što je presek i početna energijska raspodela utiču na oblik profila termalizacije. Takođe, računati su i parametri kao što je domet čestica, difuzioni koeficijent, i evolucija raspodele energije roja pozitronijuma u helijumu.

Kako je voda najzastupljeniji molekul u ljudskom organizmu, Ps–H₂O interakcija ima veliki značaj kod PET-a. Zato smo ceo postupak ponovili i za slučaj pozitronijuma u vodenoj pari. Dobijeni rezultati su uključeni u rad.

Preseci

Odlučili smo da za početnu srednju energiju roja uzmemo vrednost 3,4 eV što predstavlja polovinu energije jonizacije kvaziatoma pozitronijuma. Stoga, energijski opseg u kojem je rađena simulacija iznosi od nula do otprilike 8 eV u zavisnosti od početne energijske raspodele. Zato je neke preseke, kao na primer one date u [5], bilo neophodno ekstrapolirati za više energije. Pristup koji smo usvojili pri ekstrapolaciji preseka jeste da linearno ekstrapoliramo preseke do energije od 2 eV, nakon čega se presek drži konstantnim na vrednosti $6 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$ (slika 1). Na taj način smo obezbedili da razlike u termalizacionim profilima za različite preseke potiču isključivo od razlika u preseccima na niskim energijama.



Slika 1. Preseci za prenos impulsa Ps–He korišćeni u ovom radu.

Figure 1. Momentum transfer cross-sections used in this paper.

*Rad saopšten na skupu „Osmo konferencija mladih istraživača“, Beograd, 21–23. decembar 2009.

Autor za prepisku: S.D. Marjanović, Institut za fiziku, Pregrevica 118, 11080 Beograd, Srbija.

E-pošta: msrdjan@ipb.ac.rs

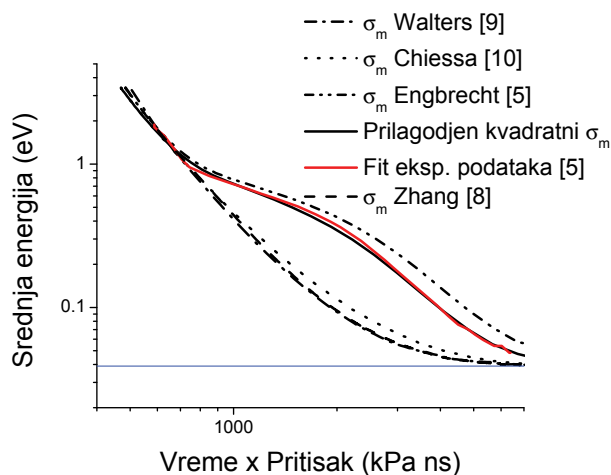
Rad primljen: 21. decembar 2009.

Rad prihvaćen: 26. januar 2010.

Preseci koje smo koristili su teorijski preseci za prenos impulsa dobijeni pomoću SVM (*Stochastic Variational Method*) metode [8,9] i difuzione Monte Karlo metode [10] kao i eksperimentalno mereni presek za prenos impulsa koji su dali Engbrecht i saradnici [5]. Očigledna je razlika u obliku teorijski i eksperimentalno dobijenih preseka, u smislu da eksperimentalno određeni presek na niskim energijama pokazuje jaku (kvadratnu) zavisnost od energije.

Pored ovih preseka, dali smo predlog preseka koji je dobijen prilagođavanjem kvadratnog preseka datog u literaturi [5], s ciljem da se postigne što bolje slaganje sa eksperimentalnim rezultatima. Presek je prilagođen tako što je minimum podignut na vrednost od $1,8 \times 10^{-16}$ cm². Svi preseci su smatrani za izotropne. Na slici 1 dati su svi preseci korišćeni u ovom radu.

Kako početna srednja energija roja pozitronijuma u eksperimentu [5] nije poznata, da bismo mogli uporediti rezultate simulacije sa eksperimentom, računane energije smo pomerili u vremenu tako da se u tački 2 eV poklope sa eksperimentom. Čestice imaju srednje vreme života 61 ns kao što je predloženo u literaturi [5]. Za početnu energijsku raspodelu pretpostavili smo Maxwell–Boltzmann-ovu raspodelu što smatramo opravdanim, kako ćemo kasnije i pokazati. Pritisak pozadinskog helijuma je 208,6 torr (4 psi; 0,0278 MPa), a temperatura je 305 K. Slika 2 prikazuje termalizacione profile za različite preseke sa slike 1.



Slika 2. Termalizacioni profile, za različite preseke Ps – He prikazane na slici 1, dobijeni Monte Karlo simulacijom. Crvena linija je fit eksperimentalnih podataka predstavljen u [5]. Plava linija predstavlja nivo termalne energije. Figure 2. Thermalization profiles for different Ps – He cross-sections presented in Figure 1, obtained by Monte Carlo simulation. The red line represents the fit of experimental data presented in [5]. The blue line is thermal energy.

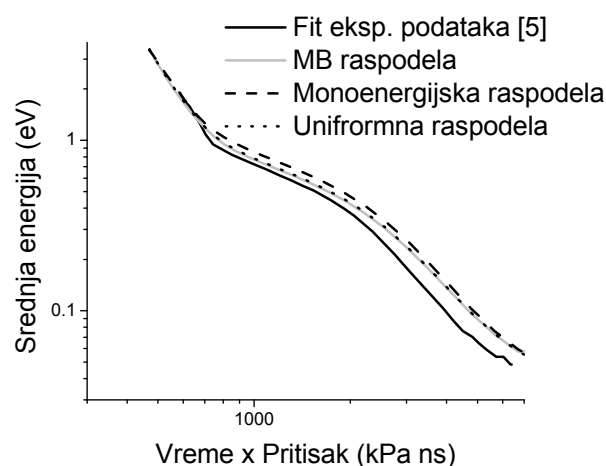
Poredeći termalizacione profile vidimo da najbolje slaganje sa eksperimentalnim rezultatima daje presek koji ima izraženu energijsku zavisnost [5]. Ovaj rezultat

pokazuje da teorija koju su dali Nagashima i saradnici [6], a koju su pri određivanju preseka koristili Engbrecht i saradnici daje dobro slaganje. Ipak, pokazali smo da je moguće dobiti još bolje slaganje koristeći modifikovani kvadratni presek.

U daljim simulacijama u helijumu koristili smo kvadratni presek za prenos impulsa iz literature [5].

Energijska raspodela

Da bismo ispitili koliki uticaj na termalizacioni profil imaju različite energijske raspodele, pustili smo simulacije sa tri različite energijske raspodele: uniformna, Maxwell–Boltzmann-ova, i monoenergijska; sa istom srednjom energijom 3,4 eV. Rezultati simulacija su prikazani na slici 3. Jedina vidljiva značajnija razlika vidi se kod monoenergijske raspodele koja najsporije termalizuje.



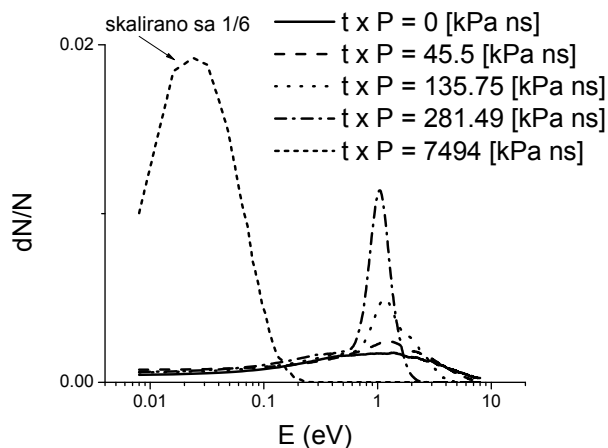
Slika 3. Poređenje termalizacionih profila za različite energijske raspodele.

Figure 3. Comparison of thermalization profiles for different energy distributions.

Na slikama 4–6 prikazana je vremenska evolucija energijskih raspodela. Početna raspodela brzo dobija prelazni oblik, koji je sličan za sve raspodele, i na kraju postaje Maxwell–Boltzmann na termalnoj energiji. Ovaj rezultat opravdava izbor Maxwell–Boltzmann raspodele kao početne raspodele energije.

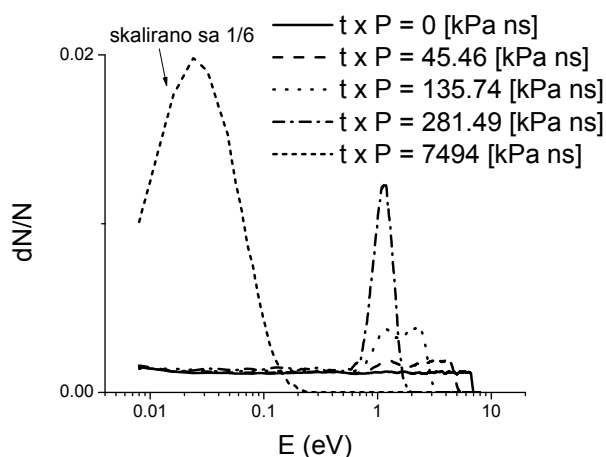
Dometa čestica, difuzioni koeficijent i vreme života

Sve čestice su inicijalizovane u nultoj tački, i data im je izotropna raspodela brzina. To nam omogućava da procenimo dubinu prodiranja pozitronijuma u pozadinski gas, u ovom slučaju helijum, kao srednje rastojanje čestica od početne tačke. Ovakav pristup se može primeniti pri proceni dometa prodiranja u raznim tečnostima i tkivima. Zavisnost dometa od vremena prikazana je na slici 7.



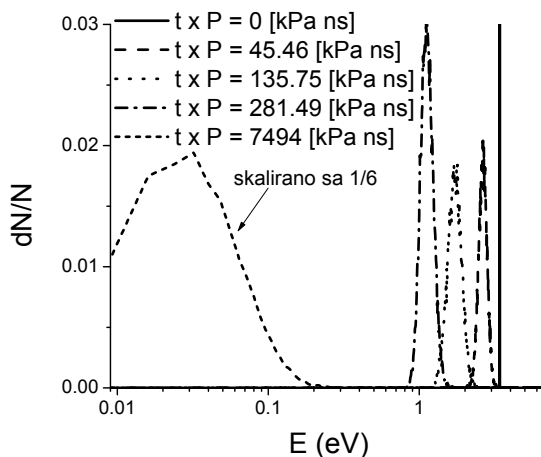
Slika 4. Vremenska evolucija Maxwell-Boltzmann energijske raspodele.

Figure 4. Temporal evolution of Maxwell-Boltzmann energy distribution.



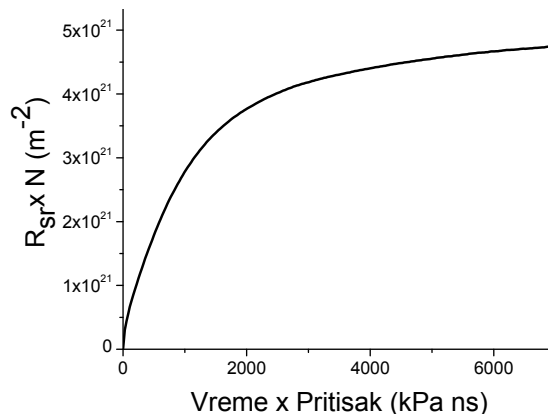
Slika 5. Vremenska evolucija uniformne energijske raspodele.

Figure 5. Temporal evolution of uniform energy distribution.



Slika 6. Vremenska evolucija monoenergetske raspodele roja pozitronijuma u helijumu.

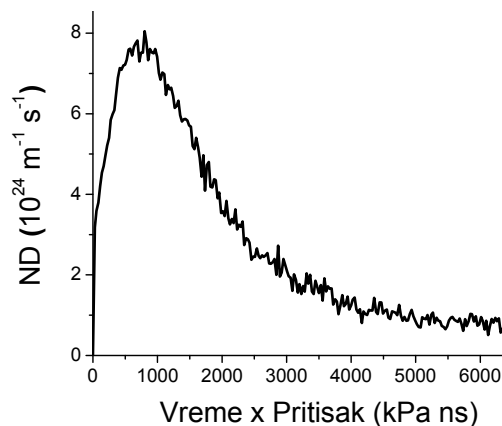
Figure 6. Temporal evolution of monoenergetic energy distribution.



Slika 7. Zavisnost dometa čestica u prostoru od vremena.

Figure 7. Spatial range of Ps penetration in He.

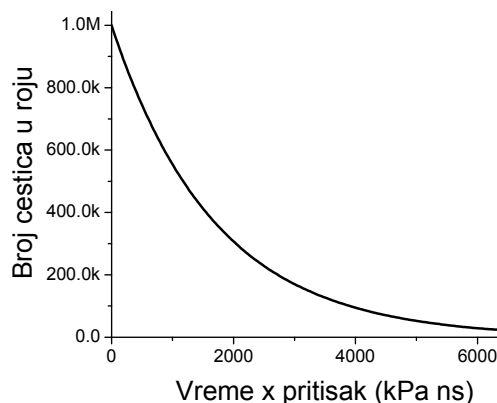
Za modelovanje transporta čestica u fluidnim modelima, neophodni su nam transportni koeficijenti [11]. Monte Karlo simulacija je pogodan alat za računanje transportnih koeficijenata. Na slici 8 dat je difuzioni koeficijent za pozitronijum u helijumu.



Slika 8. Difuzioni koeficijent za pozitronijum u helijumu.

Figure 8. Diffusion coefficient of Ps in He background.

Kako su autori u literaturi predložili [5], čestice u simulaciji imaju srednje vreme života od 61 ns. Na slici 9 prikazana je zavisnost broja čestica u roju od vremena.



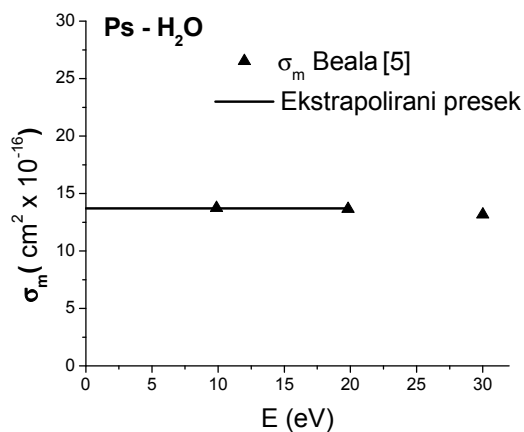
Slika 9. Zavisnost broja čestica u roju od vremena.

Figure 9. Number of particles in swarm over time.

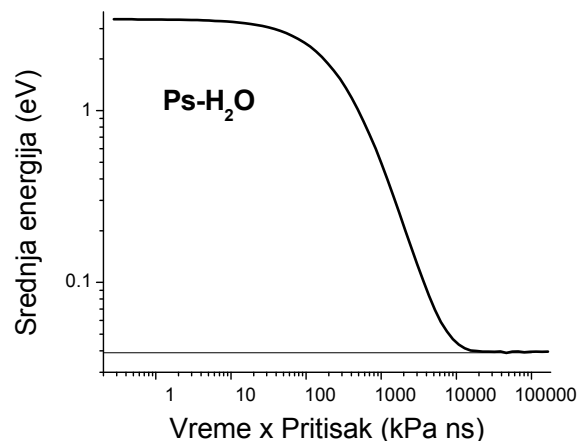
Termalizacija Ps u vodenoj pari

Kako je simulacija dala dobro slaganje sa eksperimentalnim rezultatima u slučaju pozitronijuma u helijumu, mogli smo da primenimo isti pristup sa presekom za interakciju Ps-H₂O koji je dat u literaturi [12]. Iako

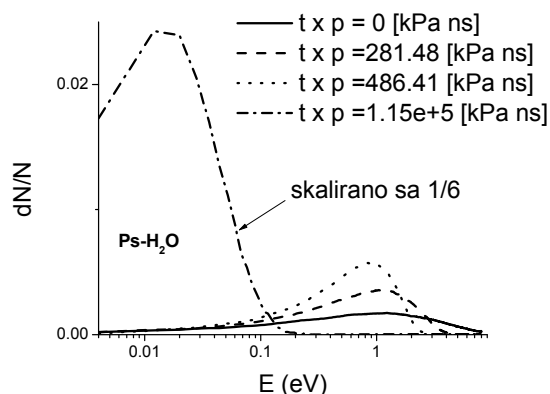
dati presek ne pokriva termalne energije, ekstrapolirali smo ga na konstantnu vrednost kako bismo dobili procenu reda veličine preseka. Takav presek, prikazan na slici 10, korišćen je da bi se dobili rezultati prikazani na slikama 11–14.



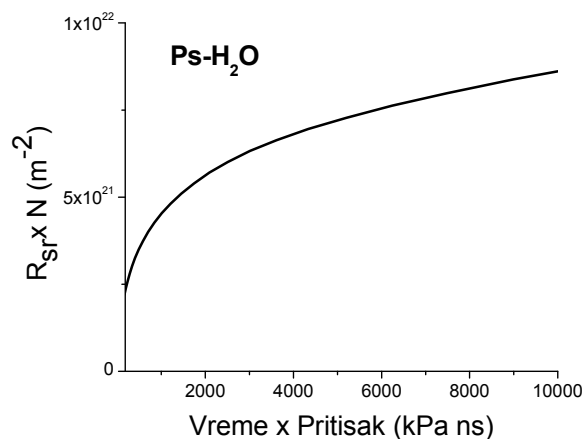
Slika 10. Totalni elastični presek za sudar Ps-H₂O procenjen za niske energije iz preseka datog u [12].
Figure 10. Total elastic cross-section for Ps-H₂O collision estimated for low energies from cross-section presented in [12].



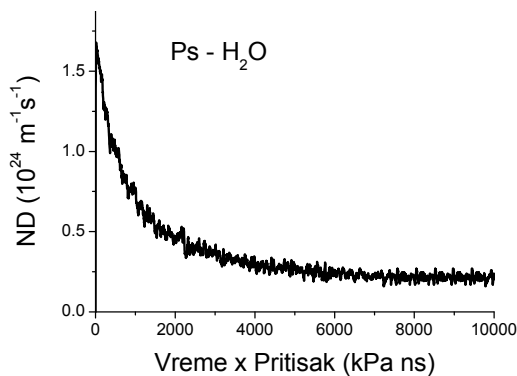
Slika 11. Termalizacioni profil za Ps u vodenoj pari.
Figure 11. Thermalization profile for Ps in H₂O vapour.



Slika 12. Vremenska evolucija Maxwell-Boltzmann energijske raspodele roja pozitronijuma u vodenoj pari.
Figure 12. Temporal evolution of Maxwell-Boltzmann energy distribution of positronium swarm in H₂O vapour.



Slika 13. Domet prodiranja pozitronijuma u vodenoj pari.
Figure 13. Spatial range of Ps penetration in H₂O vapour.



Slika 14. Difuzioni koeficijent za pozitronijum u vodenoj pari.
Figure 14. Diffusion coefficient for Ps in H₂O vapour.

ZAKLJUČAK

Rezultati za termalizacione profile pozitronijuma u helijumu ukazuju da, ukoliko želimo dobro slaganje sa eksperimentom, neophodno je koristiti presek koji jako zavisi od energije. Ipak, da bi se iz termalizacionog profila preciznije određivao presek, potrebno je proširiti prethodno postavljenu teoriju [6]. Očigledna neslaganja između teorijski računatih Ps–He preseka [8,9,10] i preseka određenih iz eksperimenata sa Doppler-ovim širenjem [5] ne proizilaze iz pretpostavke energijske raspodele, i mogu se razrešiti ili dodatnim merenjima koja bi podržala teorijsko predviđanje, ili korigovanjem teorije.

Zahvalnica

Ovaj rad je omogućen sredstvima Ministarstva za nauku i tehnološki razvoj, broj projekta: 141025.

LITERATURA

- [1] C.M. Surko, R.G. Greaves, *Phys. Plasmas* **11** (2004) 2333–2348.
 [2] J.P. Sullivan, A. Jones, P. Caradonna, C. Makočekanwa, S.J. Buckman, *Rev. Sci. Instrum.* **79** (2008) 113105.

- [3] M. Šuvakov, Z.Lj. Petrović, J.P. Marler, S.J. Buckman, R.E. Robson, G. Malović, *New J. Phys.* **10** (2008) 053034.
 [4] A. Banković, Z.Lj. Petrović, R.E. Robson, J.P. Marler, S. Dujko, G. Malović, *Nucl. Instrum. Methods B* **267** (2009) 350–353.
 [5] J.J. Engbrecht, M.J. Erickson, C.P. Johnson, A.J. Kolan, A.E. Legard, S.P. Lund, M.J. Nyflot, J.D. Paulsen, *Phys. Rev. A* **77** (2008) 012711.
 [6] Y. Nagashima, T. Hyodo, K. Fujiwara, A. Ichimura, *J. Phys. B* **31** (1998) 329.
 [7] Z. Ristivojević, Z. Lj. Petrović, unpublished.
 [8] J.Y. Zhang and J. Mitroy, *Phys. Rev. A* **78** (2008) 012703.
 [9] H. Walters, A. Yu, S. Gilmore, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B* **221** (2004) 149–159.
 [10] S. Chiesa, M. Mella, G. Morosi, *Phys. Rev. A* **66** (2002) 042502.
 [11] R.E. Robson, R.D. White, Z.Lj. Petrovic, *Rev. Modern Phys.* **77** (2005) 1303–1320.
 [12] J. Beale, S. Armitage G. Laricchia, *J. Phys. B* **39** (2006) 1337–1344.

SUMMARY

MONTE CARLO SIMULATION OF POSITRONIUM THERMALIZATION IN GASES

Srđan D. Marjanović, Milovan Šuvakov

Institute of Physics, Pregrevica 118, 11080 Belgrade, Serbia

(Scientific paper)

In this paper we present the results of Monte Carlo simulations of positronium (Ps) swarm thermalization in helium (He) and water vapour. We have investigated the temporal evolution of energy and spatial parameters of the swarm and their sensitivity to the shape of the cross-section and the initial energy distribution. Positron annihilation spectroscopy (PAS) and positron emission tomography (PET) are techniques that depend on annihilation of positronium in materials and tissue. The results obtained point that the Monte Carlo technique shows good agreement with experimental results and is capable of accurately describing the behaviour of Ps particles including the energy, particle lifetime and the moment and location of the annihilation.

Ključne reči: Pozitronijum • Termalizacija • Helijum • Vodena para • Monte Carlo

Key words: Positronium • Thermalization • Helium • H₂O Vapour • Monte Carlo