

# 分子 $XH$ ( $X = O, S, Se$ 和 $Te$ ) 中的正电子能级与正电子原子

朱正和<sup>1)†</sup> 付依备<sup>2)</sup>

1) (四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

2) (中国工程物理研究院, 绵阳 621900)

(2010年7月21日收到; 2010年10月28日收到修改稿)

基于全对称群的 Dirac 方程, 研究当存在核场时的正电子能级及其与核场的关系, 即计算在分子 OH, SH, SeH 和 TeH 的核场下的正电子能级. 这时正电子的能量约为  $e^+ = -1.022$  MeV. 对于低能级, 当核场强增大时, 其能量有所升高, 而对较高能级, 核场强增大时, 其能量无明显变化. 正负电子的湮没过程为三光子湮没过程 (the three-photon annihilation). 而当生成  $e^+ - e^-$  束缚系统, 即正电子原子 (positronium) 时, 为  $^3S$  态, 即正态的正电子原子 (orthopositronium), 为激发态, 这是由电荷宇称守恒所确定的.

**关键词:** Dirac 方程, 三光子湮没过程, 正态的正电子原子, 电荷宇称守恒

**PACS:** 03.65.Pm, 78.70.bj, 36.10.Dr

## 1. 引言

量子力学有三个不同水平, 即基于单群的非相对论, 基于双群的相对论和基于全对称群的相对论或简称为全相对论, 目前重点是全相对论, 它体现了相对论中时间与空间的等价性, 一方面使量子力学方程必需复从 Lorentz covariance 协变, 同时有空间反转又有时间反转, 这才是完全的量子力学.

在非相对论中, 哈密顿算符不含自旋, 即自旋与空间的对称性分开, 正如 LS 耦合中, 轨道角动量和自旋角动量是两个独立的运动常数. 而在相对论中, 自旋对称已失去意义. 例如, 在非相对论中,  $H_2O$  是  $C_{2v}$  群, 而在相对论中, 要由双群  $C_{2v}^+$  代替, 并引入新元素  $\bar{E}$ , 对称元素增加一倍, 而不可约表示数增加一个, 这第五个不可约表示称为费密子 (fermion) 不可约表示, 它可由费密函数展开. 而单群  $C_{2v}$  的不可约表示称为玻色子不可约表示.

非相对论不可能得到正电子能级的解, 只能得到负电子能级的解, 而相对论则可以同时得到负电子和正电子的两组能级的解. Dirac 建立了 fermions 的相对论方程并解出自由电子的 Dirac 方程, 1930 年预计了正电子的存在. 1932 年 Anderson 发现了

正电子. 正反粒子成对存在是普遍现象. 根据 Pauli 不相容原理<sup>[1]</sup>, 在真空中正能量的负电子不可能跃迁到负能态, 负能态是全部填满的 fermions 海.

在相对论中, 引入时间反转算符  $\hat{K}$ , 而  $\hat{K}$  是反酉算符, 即由于同时出现酉算符和反酉算符, 这时不可能出现两个算符之积由两个相应的酉矩阵的积来表示, 即得不到群的不可约酉表示; 但是, 仍然可构成一个矩阵的集合, 它称为共表示 (corepresentation), 可以证明, 仍然可能蜕变为不可约表示<sup>[2-4]</sup>. 包含了空间的对称性和时间反转对称性的群, 称为全对称群.

本文用基于全对称群的 Dirac 方程解当存在核场时的正电子能级及与核场关系, 即研究在分子 OH, SH, SeH 和 TeH 中的正电子能级及与核场关系. 研究正电子的能级是一项基础工作, 同时, 正负电子的湮没过程有重要实用意义, 例如, 可以研究凝聚态的性质<sup>[5-9]</sup>.

## 2. 基本理论

时间反转算符: 时间反转算符或称为 Kramer 算符  $\hat{K}$  的定义为

†E-mail: zhuxm@scu.edu.cn

$$\hat{K}\psi(r, t) = \psi^*(r, -t), \quad (1)$$

如哈密顿算符  $\hat{H}$  为  $r$  的实函数, 则有

$$\begin{aligned} \hat{K}\hat{H}(r)\psi(r, t) &= \hat{H}^*(r)\psi^*(r, -t) \\ &= \hat{H}(r)\psi^*(r, -t) \\ &= \hat{H}\hat{K}\psi(r, t), \end{aligned} \quad (2)$$

即是

$$[\hat{H}, \hat{K}] = 0, \quad (3)$$

这表示态对时间反转不变, 或称为  $\hat{K}$  与  $\hat{H}$  有相同的本征函数.

可以证明时间反转算符  $\hat{K}$  是反酉算符<sup>[10,11]</sup>, 即

$$\langle \hat{K}\psi | \hat{K}\phi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle^* = \langle \phi | \psi \rangle, \quad (4)$$

同也是反线性算符.

Kramer 定理<sup>[10]</sup>: 可以证明如,  $\hat{K}^2 = -1$ , 这对应  $J$  值为半正数, 即为费密子, 则时间反转至少产生新的双重简并; 如  $\hat{K}^2 = +1$ , 这对应  $J$  值为整数, 玻色子, 时间反转不产生新的双重简并.

对不含时间的 Dirac 方程, 算符为

$$\hat{h}_D\psi = E\psi; \hat{h}_D = \beta' mc^2 + c(\alpha \cdot \hat{p}) + \hat{V}, \quad (5)$$

式中

$$\alpha = \begin{bmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{bmatrix}; \beta' = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2I_2 \end{bmatrix}; I_2 - 2 * 2, \quad (6)$$

单位矩阵, 泡利自旋矩阵为

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}; \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}; \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (7)$$

如果  $\hat{V} = 0$ , 则为自由电子的 Dirac 方程.

时间反转算符的等价方式定义: 我们用另一种, 即由 Kramer 定理来定义时间反转算符, 如  $\hat{K}^2 = -1$ , 则有  $\hat{K}^2\phi = -\phi = \bar{\phi}$ , 即两次时间反转之后, 状态复原, 但波函数反号; 如  $\hat{K}^2 = +1$ , 则有  $\hat{K}^2\phi = \phi$ , 即两次时间反转之后, 状态复原, 但波函数不反号. 因而, 可以由 Kramer 对基组, 即  $\{\phi\}$  和  $\{\bar{\phi}\}$  来展开算符.

这时, 单电子算符<sup>[12-14]</sup>

$$\hat{h}_D = \begin{pmatrix} A & B \\ -B^* & A^* \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \hat{V} & -ic\hat{d}_z & 0 & -ic\hat{d}_- \\ -ic\hat{d}_z & -2mc^2 + \hat{V} & -ic\hat{d}_- & 0 \\ 0 & -ic\hat{d}_+ & \hat{V} & ic\hat{d}_z \\ -ic\hat{d}_+ & 0 & ic\hat{d}_z & -2mc^2 + \hat{V} \end{pmatrix}, \quad (8)$$

式中

$$\hat{d}_z = \frac{\partial}{\partial z}, \hat{d}_\pm = \frac{\partial}{\partial x} \pm i \frac{\partial}{\partial y}. \quad (9)$$

很容易得知

$$A = \begin{pmatrix} \hat{V} & -ic\hat{d}_z \\ -ic\hat{d}_z & -2mc^2 + \hat{V} \end{pmatrix} = A^+, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} B &= \begin{pmatrix} 0 & -ic\hat{d}_- \\ -ic\hat{d}_- & 0 \end{pmatrix} \\ &= -B^+ = \begin{pmatrix} 0 & -ic\hat{d}_+ \\ -ic\hat{d}_+ & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (11)$$

即,  $A$  是厄密的, 即用它作用后, 波函数不反号;  $B$  是反厄密的, 即用它作用后, 波函数反号. 这时, 有两组 Kramer 对基组, Dirac 算符  $\hat{h}_D$  体现时间反转对称性.

很容易证明,  $\hat{h}_D$  可表示为<sup>[12-14]</sup>

$$\begin{aligned} \hat{h}_D &= I_2 \otimes \begin{pmatrix} \hat{V} & 0 \\ 0 & -2mc^2 + \hat{V} \end{pmatrix} - c \check{i} \otimes \begin{pmatrix} 0 & \hat{d}_z \\ \hat{d}_z & 0 \end{pmatrix} \\ &\quad - c \check{j} \otimes \begin{pmatrix} 0 & \hat{d}_y \\ \hat{d}_y & 0 \end{pmatrix} - c \check{k} \otimes \begin{pmatrix} 0 & \hat{d}_x \\ \hat{d}_x & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (12)$$

这时 Dirac 算符表示为四元数.

四元数代数<sup>[15]</sup>: 四元数代数由 Hamilton 和 Frobenius 所发展, 但是, 很晚的时间开始有限地应用于量子力学. 四元数可表示为

$$q = \sum_{\lambda=0}^3 V_\lambda e_\lambda = V_0 + V_1 \check{i} + V_2 \check{j} + V_3 \check{k}, \quad (13)$$

式中,

$$e_1 = \check{i} \leftrightarrow i\sigma_z; e_2 = \check{j} \leftrightarrow i\sigma_y; e_3 = \check{k} \leftrightarrow i\sigma_x, \quad (14)$$

式中,  $\check{i}, \check{j}, \check{k}$  为四元数的单位数,  $i$  为虚单位,  $V_0, V_1, V_2$  和  $V_3$  是实数,  $\sigma_z, \sigma_y$  和  $\sigma_x$  为(7)式中泡利自旋矩阵. 四元数实为三维复空间和一维实空间所构成的四维向量空间. 由(7)到(11)式可知, 四元数

代数的使用建立了与时间反转对称性的联系. 包含了空间的对称性和时间反转对称性的群, 称为全对称群, 其表示称为它称为共表示 (corepresentation).

(11) 式是  $\hat{h}_D$  的四元数表示, 即为全对称群的 Dirac 算符.

四元数代数形式的 Dirac 方程

$${}^q \hat{h}_D \psi = E^q \psi. \quad (15)$$

### 3. 计算结果与讨论

本文用 Dirac08<sup>[16]</sup> 程序的 DHF 方法<sup>[17]</sup>, 基集合为 3—21G, 计算了 OH, SH, SeH 和 TeH 中的正电子的 5 个能级及其与核场强的关系. 因为对于原子 O, S, Se 和 Te 只有基集合 3—21G 才是公共可能的, 以便于对比. 计算结果见表 1 (自由负电子能量  $E/e^- = 0.511032$  MeV).

#### 3.1. 解自由负电子的 DHF 方法

得到负电子的能量为  $e = mc^2$ , 即  $e^- = +0.511032$  MeV, 而正电子的能量为  $e^+ = -0.511032$  MeV, 与这个能量相当的光子波长为  $0.0242 \text{ \AA}$ . 由表 1 可以看出, 而在分子的核场强的作用下, 而正电子的能量约为  $e^+ = -1.022$  MeV, 增大一倍. 如果假设核场强为零, 自由负电子的能量为  $e^- = +0.511032$  MeV, 则将这个数值加在所有正电子的能级上, 得到相当于核场强为零时自由正电子的能级为  $e_F^+$ , 无论是  $e^+$  或  $e_F^+$  都与核场强有关. 见表 2, 图 1 与图 2, 对低能级, 即能级 1, 无论是正电子或自由正电子, 核场强增时, 其能量有所升高, 而对较高能级, 即能级 5, 无论是正电子或自由正电子, 核场强增时, 其能量无明显变化.

表 1 OH, SH, SeH 和 TeH 中的正电子能级

$E/\text{MeV}$	能级 1	能级 2	能级 3	能级 4	能级 5
OH: $E(e^+)/\text{MeV}$	-1.022076	-1.022038	-1.022031	-1.022030	-1.022004
$E(e_F^+)/\text{MeV}$	-0.511044	-0.511006	-0.510999	-0.510998	-0.510972
SH: $E(e^+)/\text{MeV}$	-1.022028	-1.022017	-1.022008	-1.022008	-1.022005
$E(e_F^+)/\text{MeV}$	-0.510996	-0.510985	-0.510976	-0.510976	-0.510973
SeH: $E(e^+)/\text{MeV}$	-1.022024	-1.022021	-1.022010	-1.022008	-1.022008
$E(e_F^+)/\text{MeV}$	-0.510992	-0.510989	-0.510978	-0.510976	-0.510976
TeH: $E(e^+)/\text{MeV}$	-1.022016	-1.021999	-1.022004	-1.022004	-1.022003
$E(e_F^+)/\text{MeV}$	-0.510984	-0.510967	-0.510972	-0.510972	-0.510971

表 2 图 1 与图 2 中的正电子能级和自由正电子能级与核场强的关系

	正电子能级 1 (虚线)	正电子能级 5 (实线)	自由正电子能级 1 (虚线)	自由正电子能级 5 (实线)
OH	-1.022076	-1.022004	-0.511044	-0.510972
SH	-1.022028	-1.022005	-0.510996	-0.510973
SeH	-1.022024	-1.022008	-0.510992	-0.510976
TeH	-1.022016	-1.022003	-0.510984	-0.510971

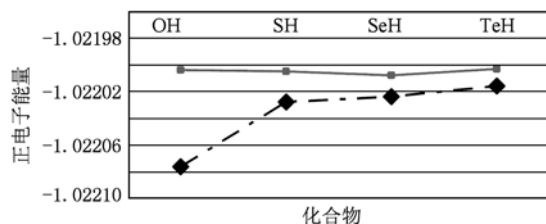


图 1 正电子能量与核场强的关系 (实线为能级 5, 虚线为能级 1)

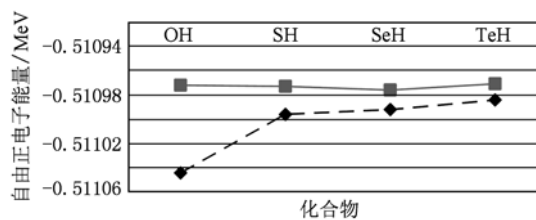


图 2 自由正电子能量与核场强的关系 (实线为能级 5, 虚线为能级 1)

### 3. 2. 正电子与负电子的相互作用有三种通道

直接的弹性或非弹性碰撞<sup>[18-20]</sup>, 正电子与靶原子或分子碰撞, 可以激发或电离靶, 这属于此种通道. 其次是正负电子的湮没过程, 如果电子对  $e^+ - e^-$  处于相同的空间, 并且入射能量达到其阈值, 即  $e = 2mc^2 = 1.02206$  MeV 时, 正负电子湮没, 同时产生  $\gamma$  光子对, 即

$$e^+ + e^- \longrightarrow \text{光子对}$$

所对应的正负电子产生的能量分别为  $-0.511032$  和  $+0.511032$  MeV. 相反的过程也观察到. 在所述核场强下, 因为正电子的能量为  $e^+ = -1.022$  MeV, 则湮没过程会产生三个  $\gamma$  光子, 即

$$e^+ + e^- \longrightarrow \text{三光子}$$

正如 Feynmann 所述的三光子湮没过程 (the three-photon annihilation).

自由正电子与定态负电子的两光子湮没过程的截面<sup>[21]</sup>, 1930 年由 Dirac 给出为

$$\sigma_{(2)} = \frac{\pi r_0^2}{\gamma + 1} \left\{ \frac{\gamma^2 + 4\gamma + 1}{\gamma^2 - 1} \ln[\gamma + \sqrt{(\gamma^2 - 1)}] - \frac{\gamma + 3}{(\gamma^2 - 1)} \right\}.$$

式中  $\gamma = \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2}$ ,  $r_0 = \frac{e^2}{m_0 c^2}$  为经典电子半径.

在低能下 ( $\frac{v}{c} \leq \alpha$ ), 两光子湮没过程的截面反比于正电子的速度  $v$ ,

$$\sigma_{(2)} = \frac{\pi r_0^2}{v},$$

因而湮没概率独立于正电子的速度  $v$  并比例于电子密度  $n_e$ .

$$\Gamma_{(2)} = \sigma_{(2)} v n_e = \pi r_0^2 c n_e,$$

现将经典电子半径和某些电子密度  $n_e$  下的湮没概率计算如表 3.

表 3 正电子的双光子湮没概率和寿命

经典电子半径 $r_0 = 0.281218 \times 10^{-4}$ Å			
$n_e / \text{cm}^{-3}$	对应系统	$\Gamma_{(2)} / \text{s}^{-1}$	正电子的寿命 /s
1	星际气体	$0.745 \times 10^{-14}$	$1.342 \times 10^{14}$
$10^6$	日冕	$0.745 \times 10^{-8}$	$1.342 \times 10^8$
$10^{20}$	非理想等离子体	$0.745 \times 10^8$	$1.342 \times 10^{-8}$
	NaCl	$1.5 \times 10^9$	$0.667 \times 10^{-9}$
	KCl	$1.6 \times 10^9$	$0.625 \times 10^{-9}$
	Na		$300 \times 10^{-12}$
	Ga		$230 \times 10^{-12}$
	Hg		$180 \times 10^{-12}$
$10^{30}$	量子等离子体	$0.745 \times 10^{16}$	$1.342 \times 10^{-16}$

例如, 钠 (AN = 11), 镓 (AN = 31) 和汞 (AN = 80) 的正电子的寿命分别<sup>[21]</sup> 约为 300, 230 和  $180 \times 10^{-12}$  s. 如果已知正电子的寿命, 则可估计电子密度.

### 3. 3. 第三种通道是生成正电子原子 (positronium)<sup>[22]</sup>

如果能量超过阈值<sup>[23]</sup>, 即

$$E(\text{threshold}) = I - \frac{6.8}{n^2} (\text{eV}),$$

则正电子  $e^+$  会俘获负电子而行成对  $e^+ - e^-$  束缚系统, 称为正电子原子 (positronium), 处类氢态 ( $n, l$ ), 这时原子核不是质子, 而是正电子. 正电子原子中, 无论是正电子或负电子, 其轨道角动量的量子数  $l=0$ , 故总轨道角动量为 0, 即 S 态, 而自旋角动量的量子数, 对正电子或负电子都为 1/2, 所以, 总自旋则可为 1 或 0. 当总自旋 1 时, 则为  $^3S$  态, 可以称为正态的正电子原子 (orthopositronium); 而总自旋则可为 0 时, 则为  $^1S$  态, 可以称为仲态的正电子原子 (parapositronium). 单重态  $^1S$  更稳定<sup>[24]</sup>, 处于三重态  $^3S$  之下  $8 \times 10^{-4}$  eV (对氢原子, 正态为  $J=1$ , 仲态为  $J=0$ ). 如上所述, 因为正电子的能量为  $e^+ = -1.022$  MeV, 则湮没过程会产生三个  $\gamma$  光子, 即

$$e^+ + e^- \longrightarrow \text{三光子}.$$

如果, 入射碰撞能量达不到阈值, 不会产生湮没过程, 而是产生上述正电子  $e^+$  与负电子  $e^-$  对, 即  $e^+ - e^-$  束缚系统, 即正电子原子 (positronium). 在所述情形下, 这个正电子原子是处于  $^3S$  态, 为激发态, 即正态的正电子原子 (orthopositronium). 这是由电荷宇称守恒所确定的<sup>[25]</sup>. 因为光子的电荷宇称为  $C = (-1)^n$ , 三光子时, 为奇宇称 (odd); 而正态的正电子原子 (orthopositronium) 的电荷宇称亦为奇宇称 (odd). 同理, 由高能双光子产生的正电子原子 (positronium), 是处于仲态  $^1S$  态的正电子原子 (parapositronium).

正电子原子 (positronium) 的寿命<sup>[26]</sup> 约为  $10^{-10}$  s, (其中正态的为  $1.42047 \times 10^{-7}$  s; 仲态的为  $1.2516 \times 10^{-10}$  s), 它湮没后, 也可以再生成, 处于某种平衡中.

文献[27]用局域密度理论基于非相对论的 Schrodinger 方程计算了 ZnO 等五种半导体的寿命, 文献[28, 29]测定了  $\gamma\text{Al}_2\text{O}_3$  的长寿命为 1.77 到  $11.0 \times 10^{-9}$  s.

总之, 在分子的核场强的作用下, 而正电子的

能量约为  $e^+ = -1.022$  MeV, 增加一倍. 对低能级, 即能级 1, 无论是正电子或自由正电子, 核场强增时, 其能量有所升高, 而对较高能级, 即能级 5, 无论是正电子或自由正电子, 核场强增时, 其能量无明显变化. 湮没过程为三个  $\gamma$  光子, 即三光子

湮没过程 (the three-photon annihilation). 当生成  $e^+ - e^-$  束缚系统, 即正电子原子 (positronium) 时, 这个正电子原子是  $^3S$  态, 为激发态, 即正态的正电子原子 (orthopositronium). 这是由电荷宇称守恒所确定的.

- [1] Landu L D, Lifshitz FM 1997 *Quantum Mechanics*, Butterworth
- [2] Luding W, Falter C 1996 *Symmetries in Physics* (Berlin: Springer-Verlag Heidelberg)
- [3] Tinkham M 1964 *Group Theory and Quantum Mechanics*. (New York; McGraw-Hill)
- [4] Berengut J C, Flambaum V V, Kozlov M G 2006 *Physical Review A* **73** 012504
- [5] Animalu A O E 1977 *Intermediate Quantum Theory of Crystalline Solids*, Prentice-Hall, INC.
- [6] Seeger A 1972 *Physics Lett. A* **40** 135
- [7] Luiz Guilherme M de Macedo, Julio R Sambrano, Aguinaldo R de Souza, Antonio Carlos Borin 2007 *Chem. Phys. Lett.* **440** 376
- [8] Bieron J, Fischer C F, Indelicato P, Jonsson P, pykko P 2009 *Phys. Rev. A* **79** 052502
- [9] Saue T, Helgaker T 2002 *J. Comput. Chem.* **23** 814
- [10] Zhu Z H 2007 *Atomic and Molecular Reaction Statics* (Beijing: Science Press) (in Chinese) [朱正和 2007 原子分子反应静力学(北京:科学出版社)]
- [11] Cornwell J F 1994 *Group Theory in Physics* (London: Academic Press)
- [12] Saue T, Jensen H J Aa 1999 *J. Chem. Phys.* **111** 6211
- [13] Saue T, Jensen H J Aa 2003 *J. Chem. Phys.* **118** 5
- [14] Fleig T, Visscher L 2005 *Chemical Physics* **311** 113
- [15] Charlie H 1976 *Introduction to Mathematical Physics* (Prentice-Hall, INC. Englewood Cliffs, New Jersey)
- [16] Jensen H J A, Saue T, Visscher L, DIRAC08
- [17] Saue T, Helgaker T 2002 *J. Comput. Chem.* **23** 814
- [18] Akinori Igarashi, Mineo Kimura, Isao Shimamura 2002 *Phys. Rev. Lett.* **12** 123201
- [19] Ryzhikh G G, Mitroy J 2000 *J. Phys. B* **33** 2229
- [20] Ivanov I A, Mitroy J 2000 *J. Phys. B* **33** L831
- [21] West R N 1974 *Positron Studies of Condensed Matter* Taylor and Francis Lid.
- [22] Jean Y C, Mallon P E, Schrader D M 2003 *Principles and Applications of Positron and Positronium Chemistry*, World Scientific
- [23] Johnson C S, Pedersen L G 1986 *Problems and Solutions in Quantum Chemistry and Physics*, Dover Publication, Inc., New York
- [24] Dicke R H, Wittke J P 1980 *Introduction to Quantum Mechanics*, Addison-Wesley Publishing Company, INC.
- [25] Berestetskii V B, Lifshitz, E M, Pitaevskii LP 1994 *Relativistic Quantum Theory*, oxford: Pergamon,
- [26] Al-Ramadhan A H, Gidley D W 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 1632
- [27] Chen X L, Zhang J, Du H J, Zhou X Y, Ye B J 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 0603 (in Chinese) [陈祥磊、张杰、杜淮江、周先意、叶邦角 2010 物理学报 **59** 0603]
- [28] Zhang H J, Wang D, Chen Z Q, Wang S J, Xu Y M, Luo X H 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 7333 (in Chinese) [张宏俊、王栋、陈志权、王少阶、徐友明、罗锡辉 2010 物理学报 **59** 7333]
- [29] Zhou K, Li H, Wang Z 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** (in Chinese) [周凯、李辉、王柱 2010 物理学报 **59** 5116]

# The energy levels of positron under molecules $XH$ ( $X = O, S, Se$ and $Te$ ) and positronium

Zhu Zheng-He<sup>1)†</sup> Fu Yi-Bei<sup>2)</sup>

1) (*Institute of Atomic and Molecular Physic, Sichuan University, Chengdu 610065, China*)

2) (*China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China*)

(Received 21 July 2010; revised manuscript received 28 October 2010)

## Abstract

The present work devotes to the energy levels of positron under molecules  $XH$  ( $X = O, S, Se$  and  $Te$ ) and the relations with nuclear field using Dirac equation based on the full symmetry group. Under these nuclear fields, the energy of positron is about  $e^+ = -1.022$  MeV. For the lower energy level, the energy of positron is increased with nuclear field; for the higher energy level, the energy of positron is nearly invariant with nuclear field. In this case, it is the three-photon annihilation. The formation of the positronium is in orthopositronium  $^3S$ , excited state, followed the conservation of charge parity.

**Keywords:** Dirac equation, three-photon annihilation, orthopositronium, conservation of charge parity

**PACS:** 03.65.Pm, 78.70.bj, 36.10.Dr

---

<sup>†</sup> E-mail: zhuxm@scu.edu.cn