

# Preradiační dynamika vzácných plynů (Kr, Xe) metodou DIM

Bc. Pavel Naar

# Obsah

- Úvod
- DIM
- Hemikvantová dynamika
- Výsledky po 600ps
- Prodloužené simulace
- Výhledy do budoucna

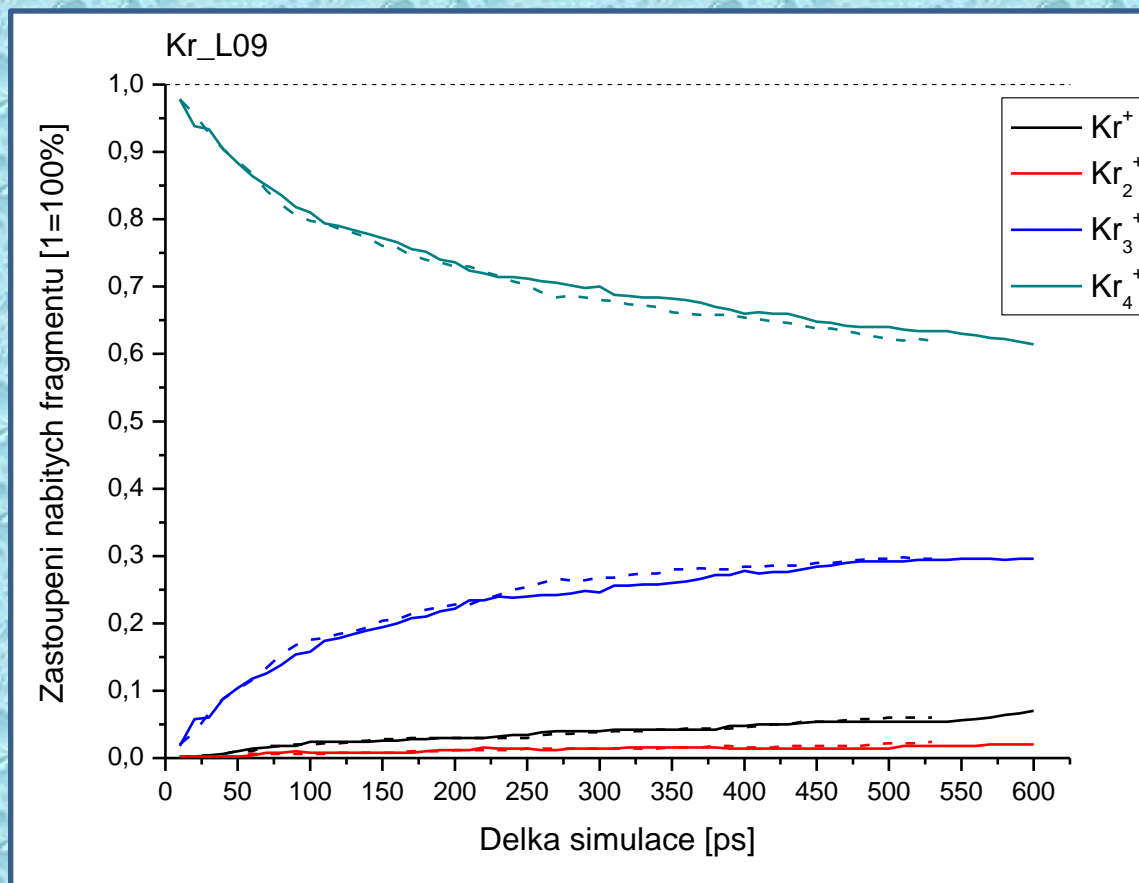
# Úvod

- Hlavní cíl: Příprava vzorků konfigurací z preradiační dynamiky (vstupy pro druhou fázi zpracování v multiškálovém modelu)
- Úkoly
  - ověření konvergence dat
  - ověření statistické závislosti těchto dat (v souvislosti s náhodnou inicializací generátoru náhodných čísel)
- Interakce, které jsme započítávali k základnímu modelu Diatomics in molecules (DIM), jsou
  - Spin-orbitální interakce (SO)
  - Interakce indukovaných dipólů (ID)
- Vibrační energii jsme nastavili na disociační limitu, což odpovídá vypaření jedné částice z klastru
- Z energetických analýz vyplývá, že by klastry  $\text{Kr}_4$  a  $\text{Xe}_4$  měly fragmentovat téměř na 100% monomerů

# DIM

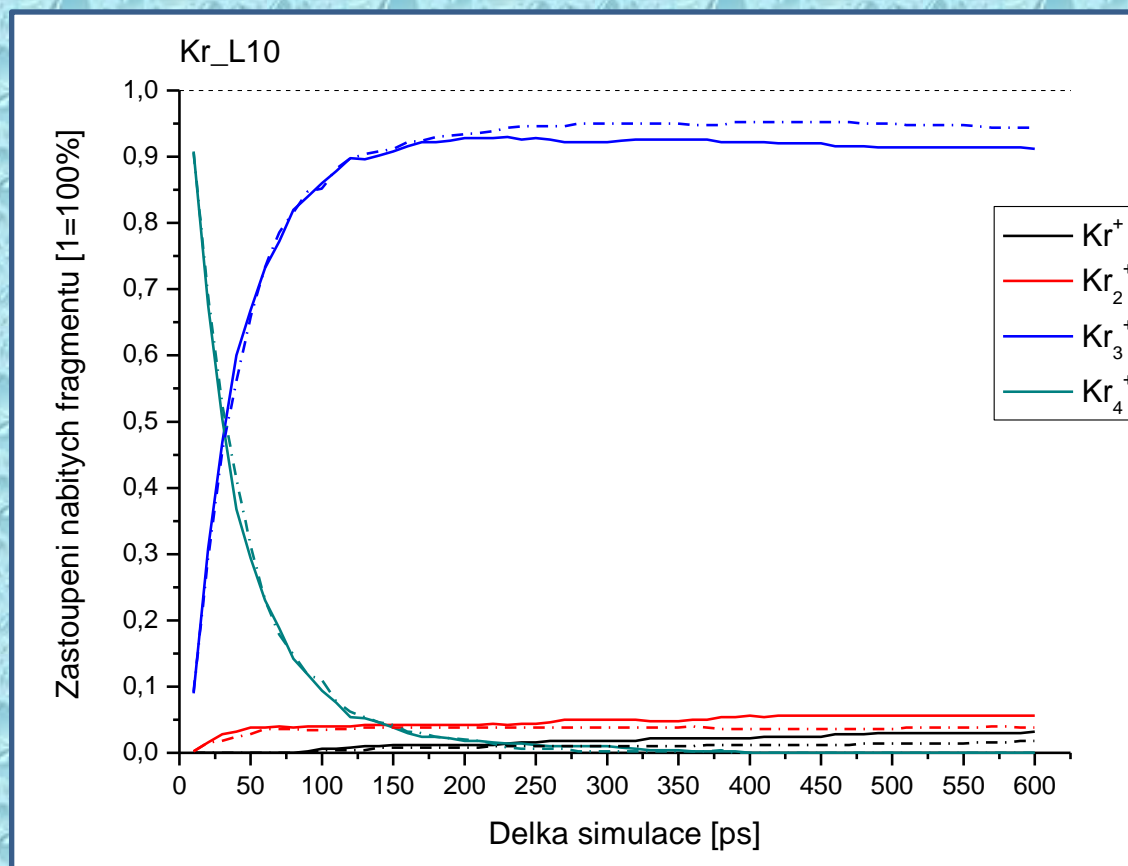
- Osvědčená metoda pro popis interakcí v homogenních vzácných plynech (vyvinuta Skupinou fyziky klastrů)
- Metoda je založena na DIM přiblížení
  - Podstata - vyjádření elektronického hamiltoniánu systému pomocí dvoujádrových členů a jednoatomových členů
- Výhody metody
  - Umožňuje rychlejší a méně náročný výpočet
  - Spolehlivost výsledků zůstává zachována

# Výsledky po 600ps pro Kr<sub>4</sub>

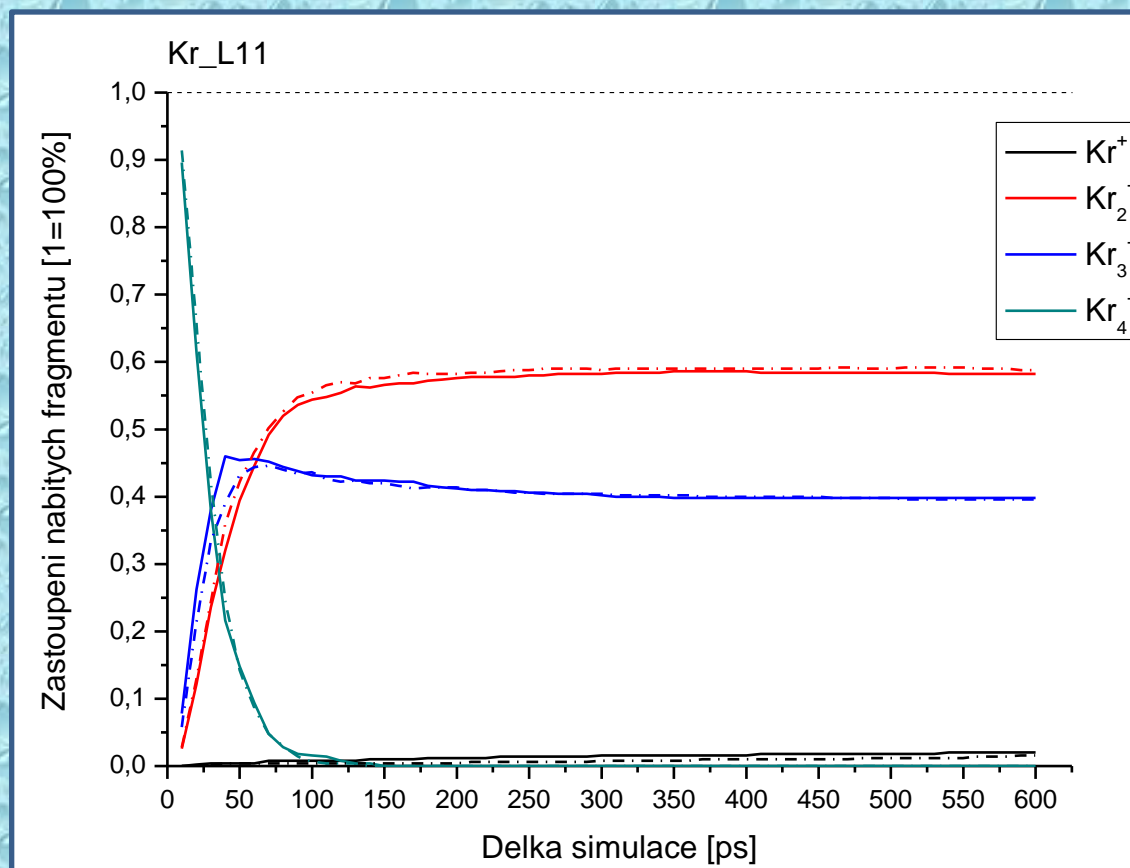


Plnou čarou jsou data z výpočtu na SPC a čárkovanou čarou jsou data z opakovaného výpočtu z Orionu

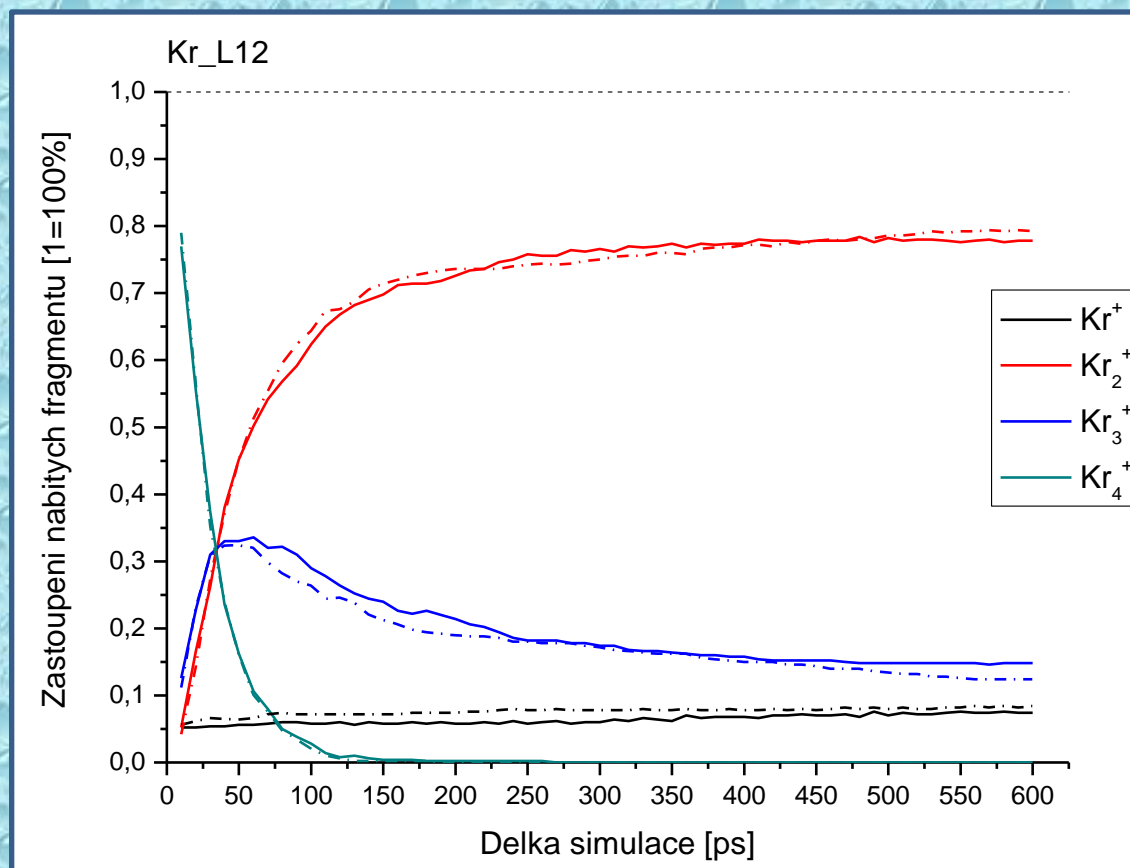
# Výsledky po 600ps pro Kr<sub>4</sub>



# Výsledky po 600ps pro Kr<sub>4</sub>

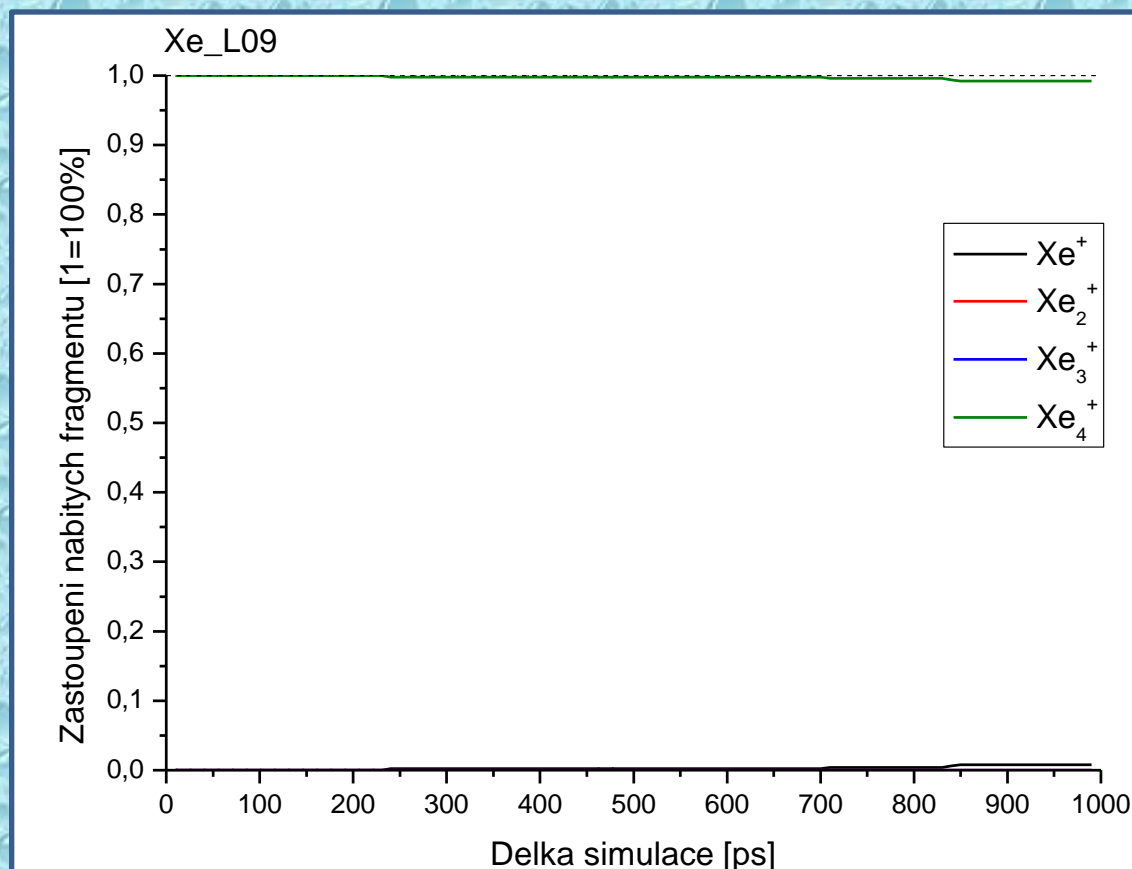


# Výsledky po 600ps pro Kr<sub>4</sub>

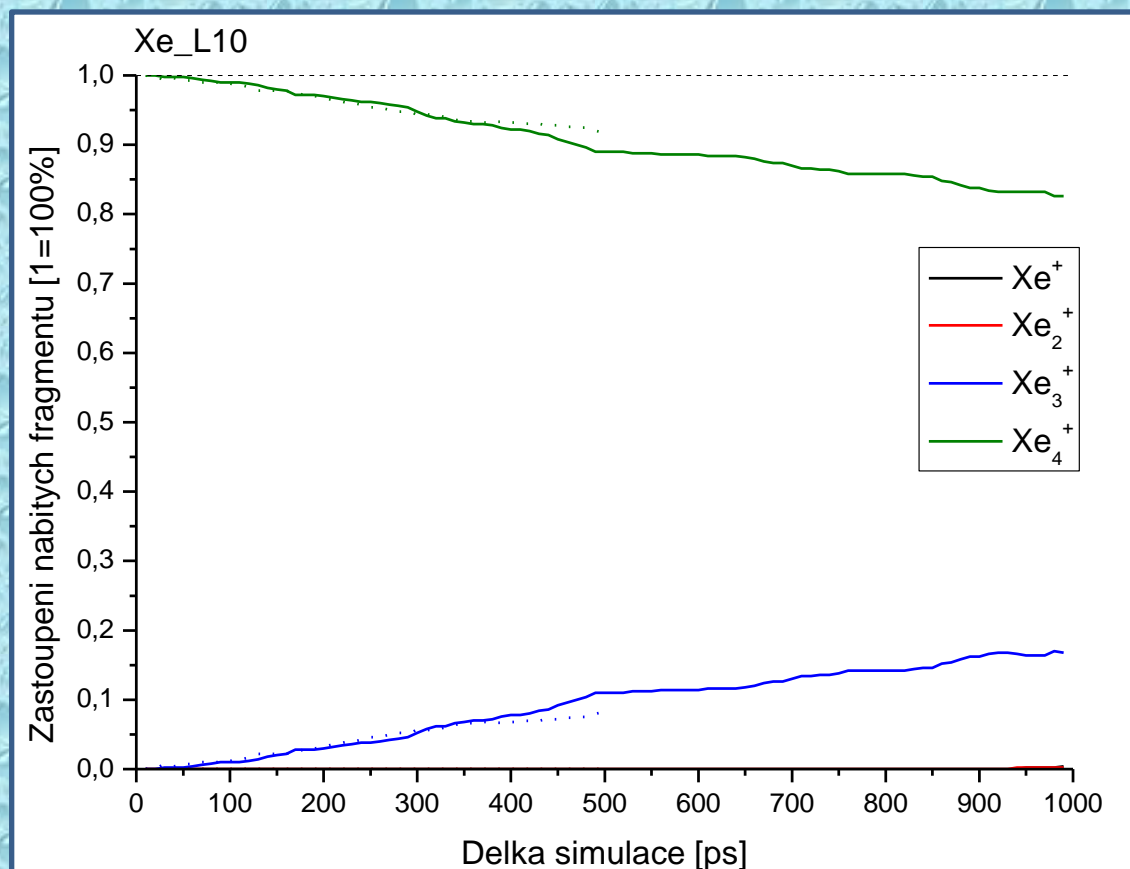




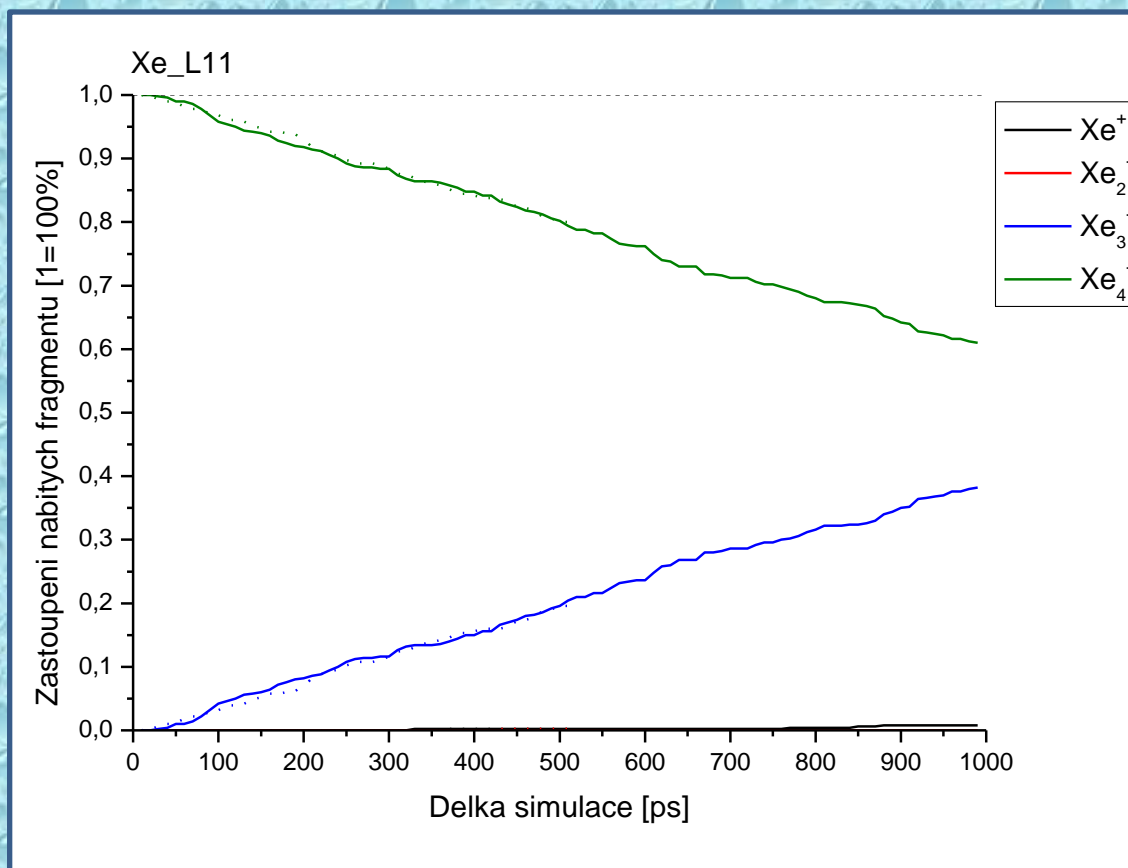
# Výsledky po 1000ps pro Xe<sub>4</sub>



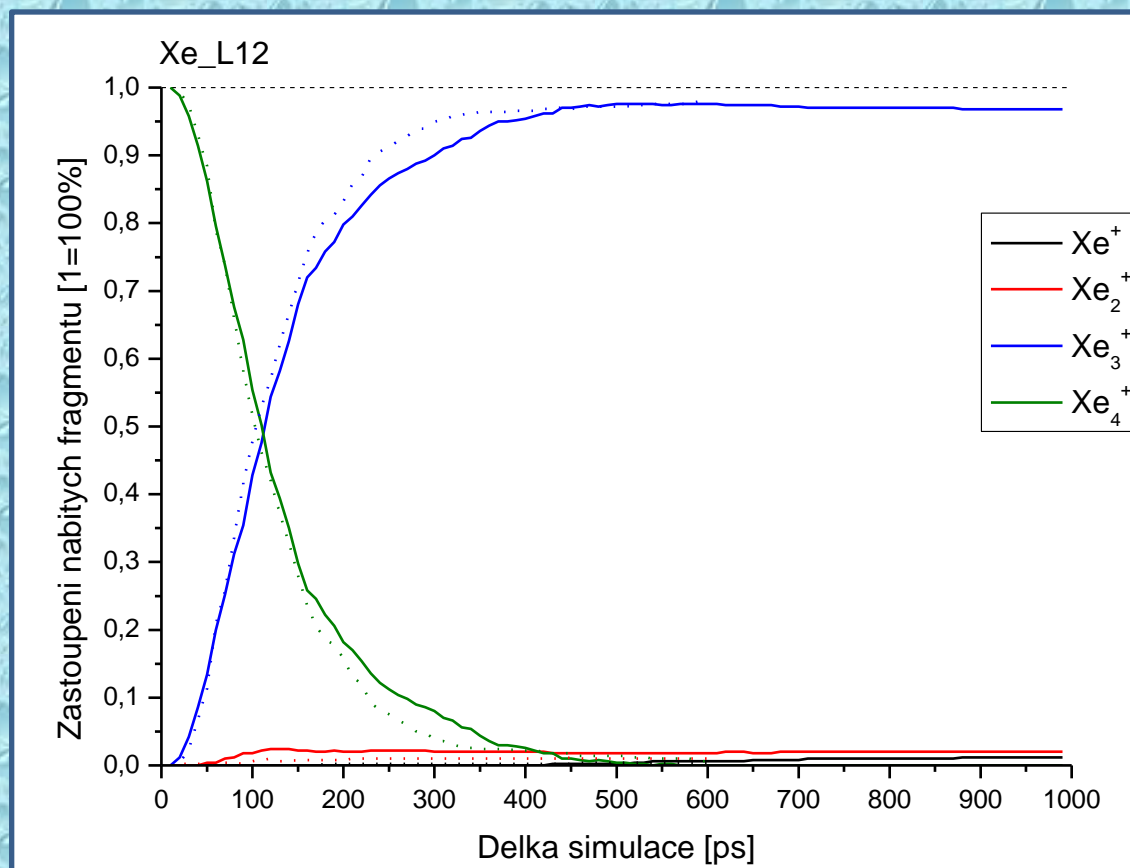
# Výsledky po 1000ps pro Xe<sub>4</sub>



# Výsledky po 1000ps pro Xe<sub>4</sub>



# Výsledky po 1000ps pro Xe<sub>4</sub>



# Výhledy do budoucna

- Provedení teoretické analýzy zastoupení nabitých fragmentů pomocí energetického kriteriá i pro větší klastry (aktuálně jen tetramer).
- Zapracování algoritmu analýzy do programu Mdisreader
- Studium významu trojčásticové interakce u fragmentací větších klastrů
- Spočtení dynamiky pro vybrané větší klastry například  $Rn_{13}$
- Porovnávání získaných výsledků s experimentem
- Studium vlivu zářivých přechodů

# Fragmentační kanály $Rn_{13}^+$

- $Rn^+ + 12Rn$
- $Rn^+ + Rn_2 + 10Rn$
- $Rn^+ + 2Rn_2 + 8Rn$
- $Rn^+ + 3Rn_2 + 6Rn$
- $Rn^+ + 4Rn_2 + 4Rn$
- $Rn^+ + 5Rn_2 + 2Rn$
- $Rn^+ + 6Rn_2$
- $Rn^+ + Rn_3 + 9Rn$
- $Rn^+ + 2Rn_3 + 6Rn$
- $Rn^+ + 3Rn_3 + 3Rn$
- $Rn^+ + 4Rn_3$
- $Rn^+ + Rn_4 + 8Rn$
- $Rn^+ + 2Rn_4 + 4Rn$
- $Rn^+ + 3Rn_4$

- $Rn^+ + Rn_5 + 7Rn$
- $Rn^+ + 2Rn_5 + 2Rn$
- $Rn^+ + Rn_6 + 6Rn$
- $Rn^+ + 2Rn_6$
- $Rn^+ + Rn_7 + 5Rn$
- $Rn^+ + Rn_8 + 4Rn$
- $Rn^+ + Rn_9 + 3Rn$
- $Rn^+ + Rn_{10} + 2Rn$
- $Rn^+ + Rn_{11} + Rn$
- $Rn^+ + Rn_{12}$
- +mnohé další kombinace jednotlivých fragmentů

Děkuji za pozornost