

# **Simulace srážkových experimentů s klastry vzácných plynů**

**Jan Premus**

*Mendelovo gymnázium,  
Komenského 5, 746 01 Opava,*

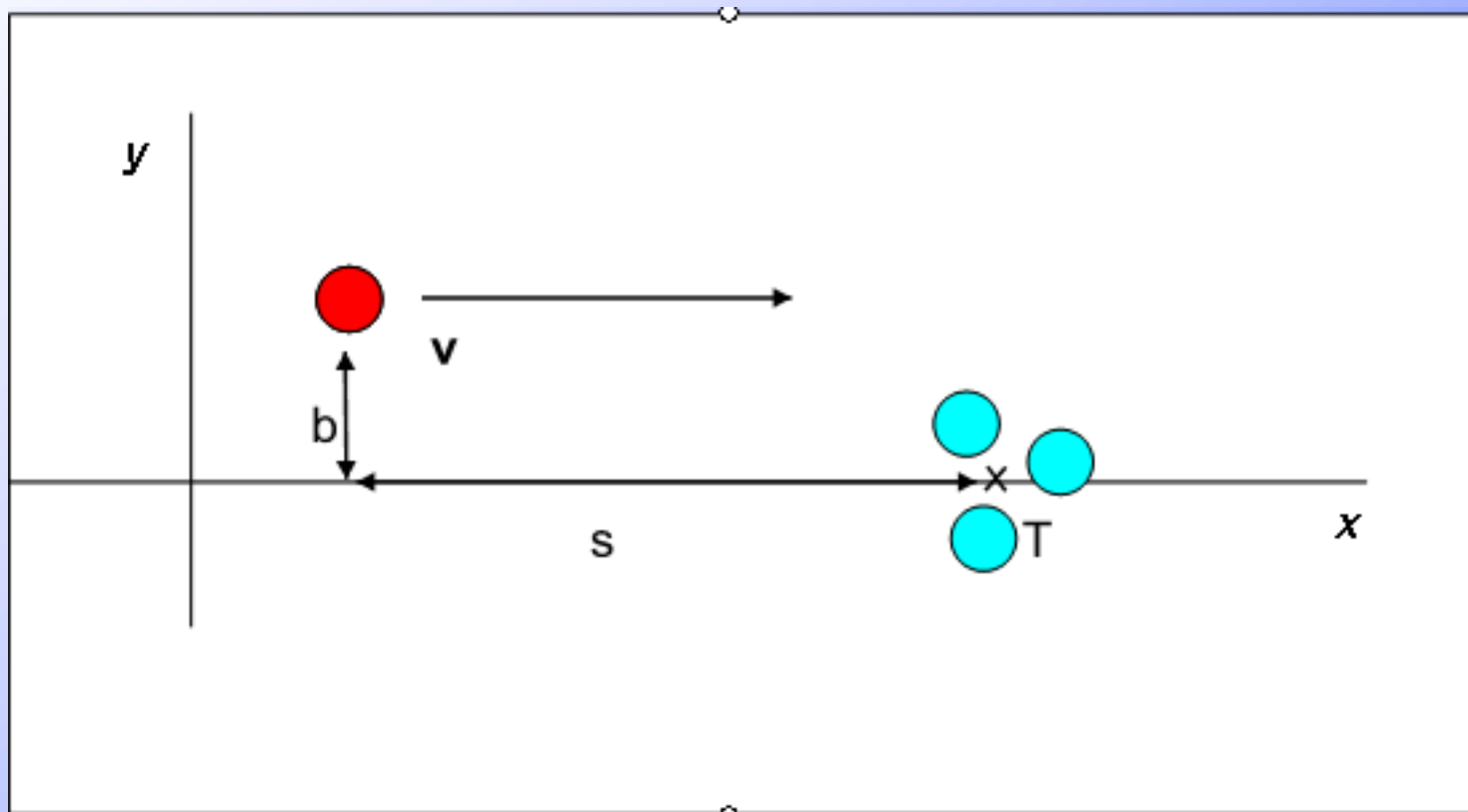
# Klastry vzácných plynů

## Význam pro teorii

- Jednoduché, ale přesné modely popisu interakcí pro neutrální i iontové klastry

# Aktuálně řešený problém

- Srážka iontu s klastrem  $Rg^+ + Rg_3 \rightarrow$  nestabilní  $Rg_4^+ \rightarrow ?$

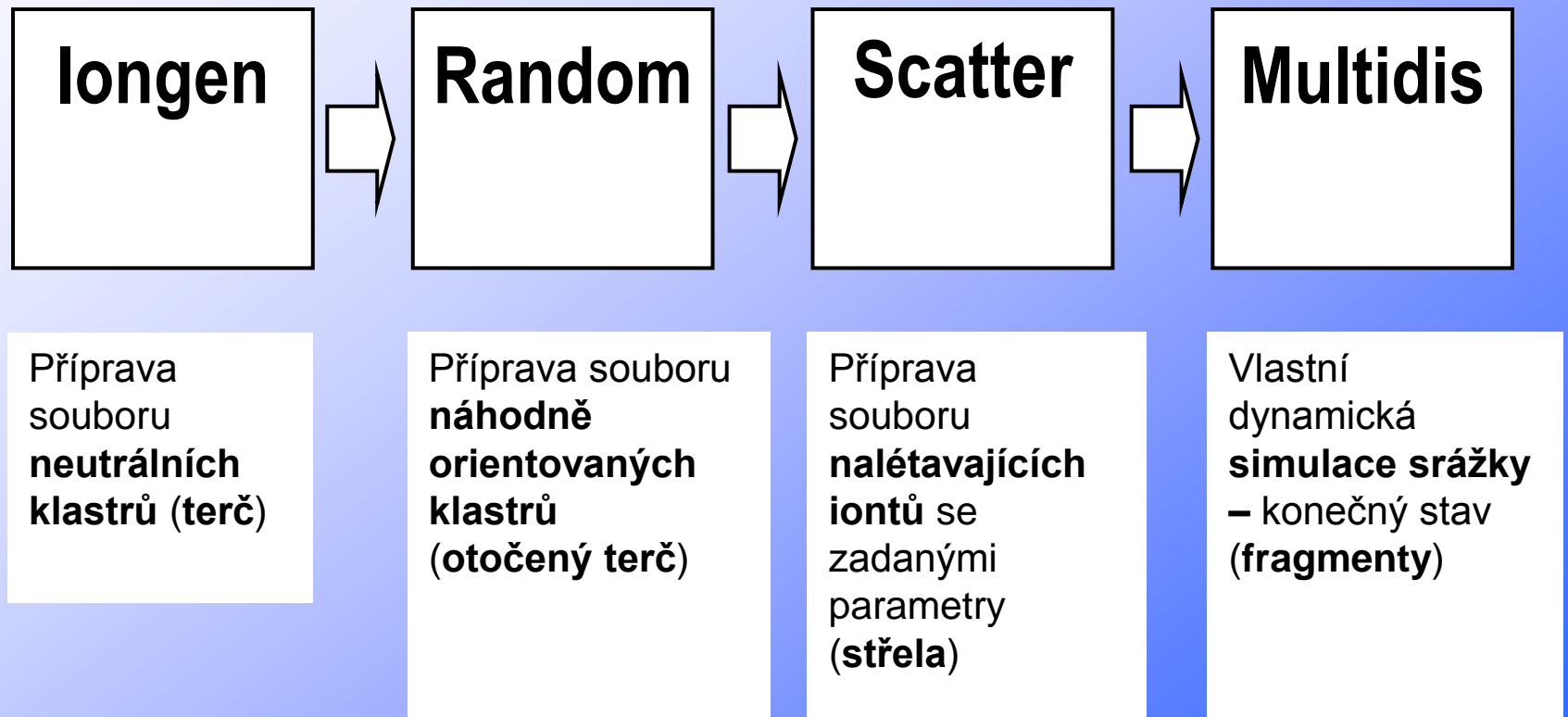


# Fragmenty

- Měřeno pouze zastoupení nabitých dimerů
- Nabité monomery nejsou odlišitelné od střel
- Zastoupení nabitých trimerů není statisticky významné

# Schéma pseudoexperimentu

## Fáze a použité programy



# Model DIM

- **Popis interakce** mezi atomy
- DIM = **diatomika v molekulách**
- **Celková energie** systému v podobě součtu **celkových energií** dvojic atomů v systému

$$H = \sum_A \sum_{B>A} H^{AB} - (N - 2) \sum_A H^A$$

# Hemikvantová dynamika

- Počítačové simulace dynamiky
- numerické řešení pohybových rovnic (klasických či kvantových)
- **Hemikvantová dynamika (HQD)**
  - elektrony kvantově
  - těžká jádra klasicky

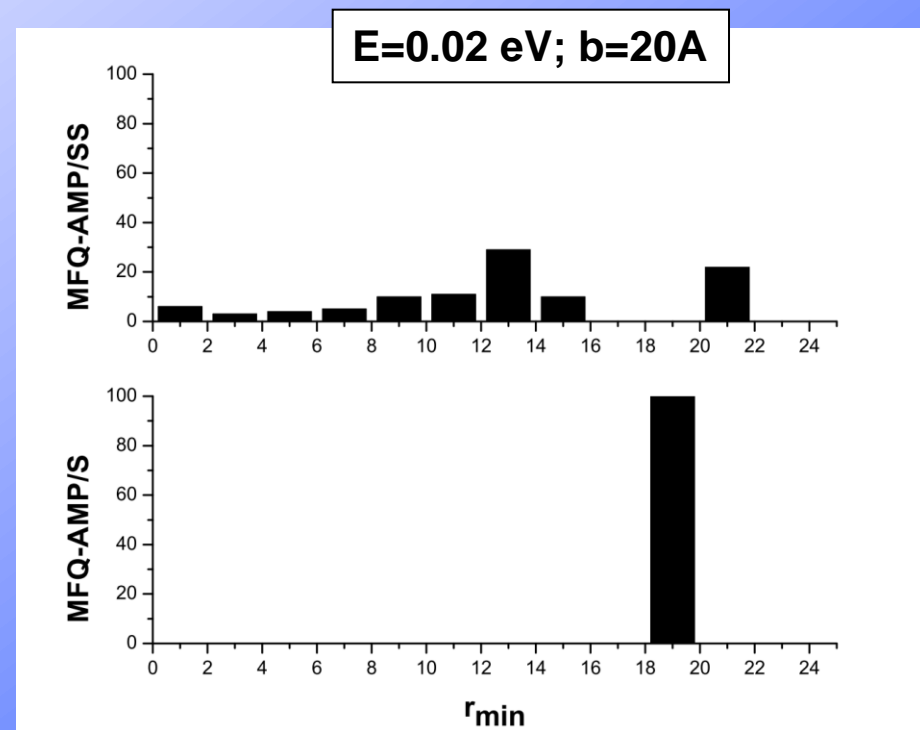
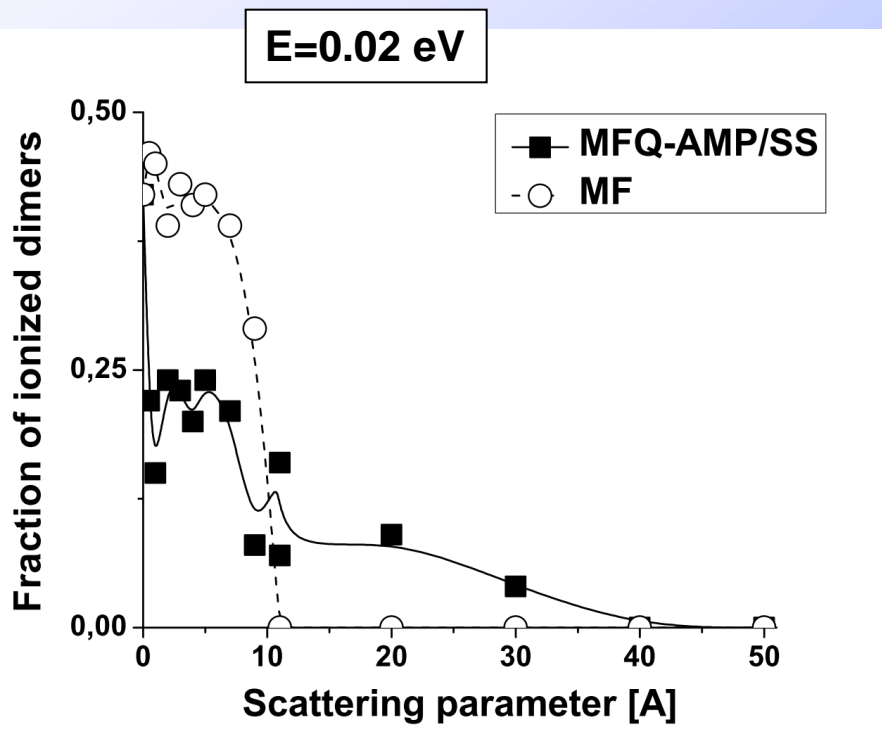
# Metoda středního pole

- **Metoda středního pole** (MF = varianta HQD)
  - Silový potenciál pro jádra - vážený průměr energií elektronových hladin
  - Váha hladiny = pravděpodobnost obsazení
- **Metoda středního pole s quenchingem - MFQ**
  - zahrnutí periodických pokusů o přeskok na konkrétní energetickou hladinu
  - odstranění parciálních nábojů na fragmentech po rozpadu systému
- **Dvě použité metody:**
  - **MFQ-AMP/S** – *scaling velocities* – pronásobení rychlostí
    - pro srážky nesplňuje ZZH
  - **MFQ-AMP/SS** – *scaling for scattering* – pronásobení pouze radiálních složek rychlostí
  - **MFQ-AMP/SR** – *scaling without rotation* – pronásobení rychlostí v rotujícím souřadnicovém systému (*připravuje se*)

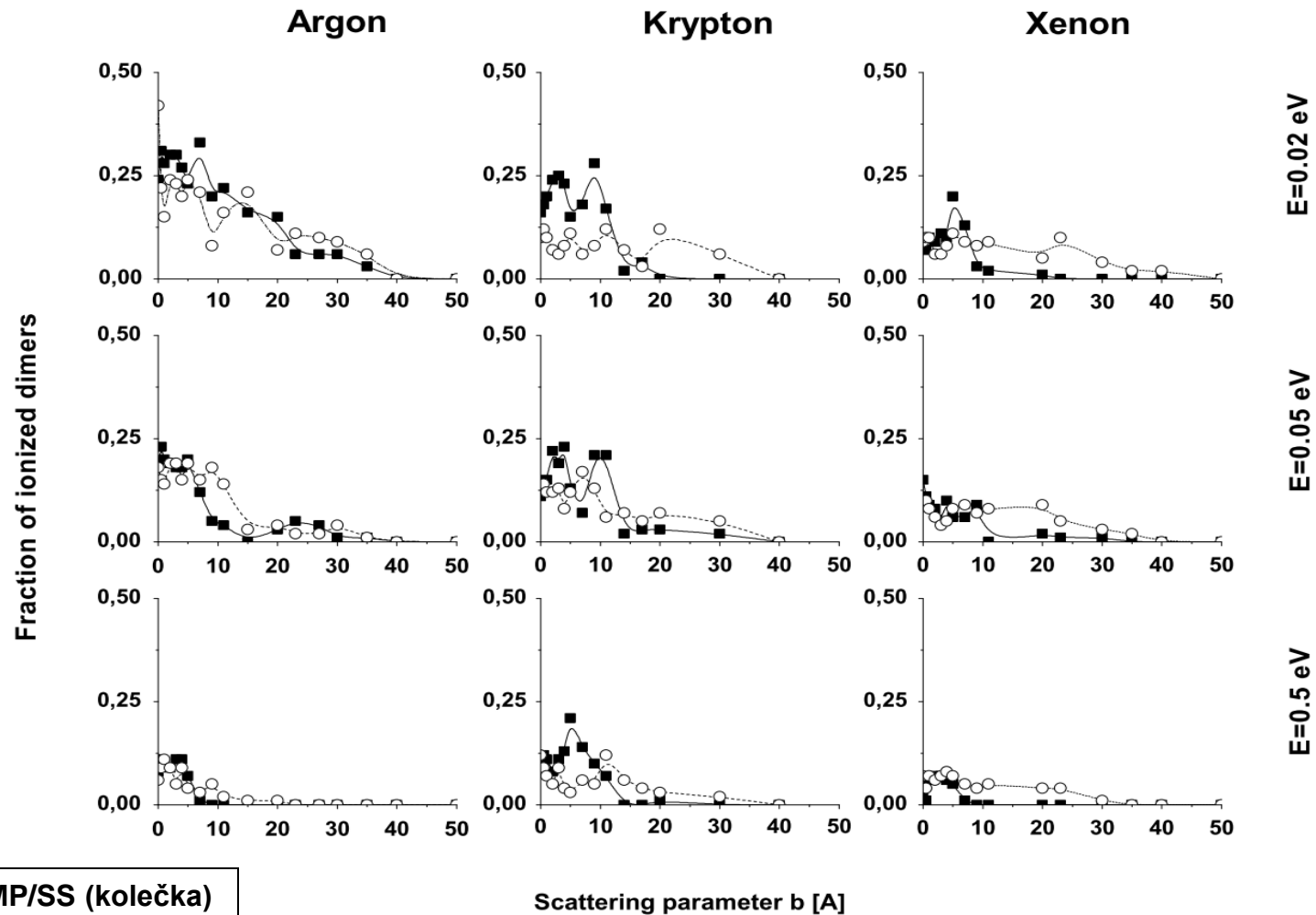


# Zahrnutí quenchingu

- zvýšení hodnot  $b$ , u kterých stále dochází k fragmentaci
- způsobeno přeskokem náboje



# Zastoupení nabitých dimerů



MFQ-AMP/SS (kolečka)  
pro srovnání  
MFQ-MP/S (čtverečky)

# Účinný srážkový průřez

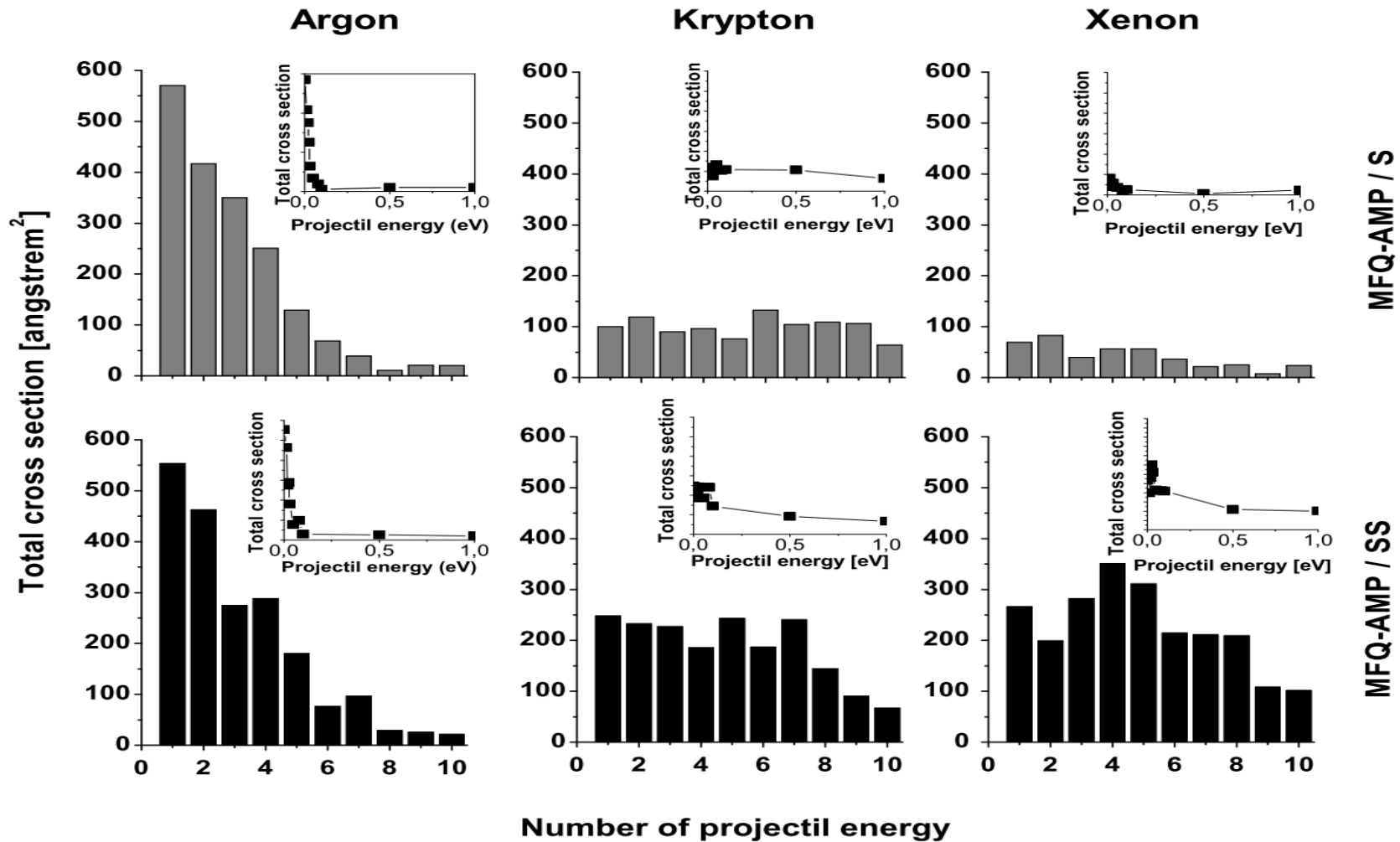
- Efektivní plocha z homogenního svazku iontů

$$\sigma = \sum_{i=1}^{i_{\max}} \left[ \frac{R_i}{N} S_i \right]$$

$$S_i = \pi \left[ \left( \frac{b_{i+1} + b_i}{2} \right)^2 - \left( \frac{b_i + b_{i-1}}{2} \right)^2 \right]$$

- $S_i$  ... plocha paprsku iontů, která po interakci s terčem produkuje  $R_i$  dimerů

# Účinný srážkový průřez



# Výsledky a závěry

- Zastoupení nabitých dimerů po srážce pro Ar, Kr, Xe
- Účinné srážkové průřezy pro vznik dimerů
- Významná role přenosu náboje při tvorbě dimerů
- Zjištěn rozdíl v chování argonu a těžších vzácných plynů
  - u argonu výraznější závislost na energii
- Rozdíly v ÚSP mezi AMP/SS a původní AMP/S metodou (hl. Kr a Xe) – dle očekávání podstatný vliv započtení ZZMH
- Příprava publikace *Theoretical study of post-scattering processes on rare gas trimers induced by accelerated ions* (I. Janeček, J. Premus, F.X. Gadea)

# Výhledy

- Nová metoda AMP/SR s pronásobením rychlostí v rotujícím systému
  - AMP/SS nezahrnuje některé vibrační módy
- Studium srážek ionizovaného trimeru (dimeru) Ar (4keV) s neutrálním atomem
  - existuje experiment
  - KER (kinetic energy release) v závislosti na úhlech rozpadu – dokážeme počítat
  - detekce poměru Dissociative Charge Transfer a Collision Induced Decay (experiment např. 0.2 / 0.8 u  $\text{Ar}_2^+$  - rozlišením pomalých a rychlých iontů)
  - Dalitz plot (? *studium*)

Pozn.: SUBPROJEKT - Srážka  $\text{Rg}^+ + \text{Rg}_3$

aktuálně útlum – úsilí soustředit na téma výše, pro nějž existuje experiment

# Studium srážek ionizovaného trimery (dimeru) Ar s neutrálním atomem (stav prací)

- **příprava metody MFQ-AMP/SR (*příprava*)**
  - *Myšlenku možno využít nejen pro původní variantu quenchingu škálováním*
- **Zobecnění procedury pro náhodnou orientaci terče (*hotovo*)**
  - *původně jen nelineární trimer*
  - *náhodné otočení  $Rg_n$  kolem osy náhodného směru*
  - *výběr vhodného trianglu (otázka lineárního klastru)*
  - *náhodná rotace celého klastru kolem osy trianglu*
- **Výchozí stav nabitého klastru (*visí příprava vibračně excitovaných*)**
  - *Z Minfind jen stabilní a metastabilní stavy (bez vibrací)*
    - *v experimentu předpoklad chladných klastrů, 15%  $Ar_2^+$  také v metastabilním  $(|l(1/2)u)$*
  - *Pro obecný elektronický a vibrační stav*
    - *(R.K. možno úpravou Fotodis)*