

ANALÝZA FRAGMENTAČNÍCH
KANÁLŮ IONIZOVANÝCH KLASTRŮ
 Rg_N ; $N > 4$, rozvoj programu
Mdisreader

Autor: Pavel Naar

Vedoucí práce: Doc. Ing. Ivan Janeček, CSc.

Práce vznikla v rámci projektu SGS17/PřF/2012

Obsah

- Popis studovaného procesu
- Úvod
- Teorie
- Postup
- Mdisreader
- Energetická analýza
- Výsledky
- Závěr a výhledy

Popis studovaného procesu

- Simulujeme proces fragmentace klastru po náhlé ionizaci
- Princip experimentu
 - Supersonickou tryskou se vyrobí klastř o příslušné velikosti
 - Následně se klastř ionizuje rychlým elektronem o energii 70eV – dojde k vyražení elektronu z klastru

Úvod

- Cílem našeho studia je zjistit, zda klastry o velikosti větší jak tetramer, mají dostatek energie na produkci nabitých monomerů a porovnat tyto hodnoty s hodnotami experimentu
- 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
- Při realizaci našeho experimentu jsme využili tři programových balíčků, vytvořených na Ostravské Univerzitě v rámci Skupiny fyziky klastrů, longen, Multidis a Mdiereader

Diatomics in molecules

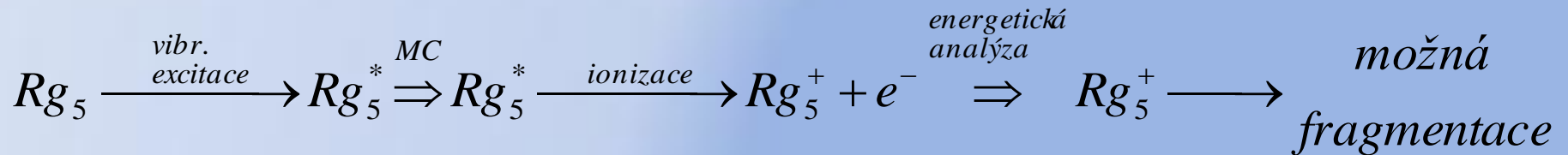
- Jedna z nejzákladnějších metod pro popis interakcí v homogenních vzácných plynech
- Základem metody je rozdělení elektronického hamiltoniánu systému na
 - Dvoujádrové členy
 - Atomové členy
- Umožňuje to rychlejší a méně náročný výpočet
- Spolehlivost výsledků zůstává zachována

Přídavné interakce

- Spin-orbitální (SO)
 - interakce je založena na vzájemném působení spinových a orbitálních momentů hybnosti elektronů. Elektron svým pohybem indukuje magnetické pole, které interaguje se spinovým magnetickým momentem.
- Interakce indukovaných dipólů (ID-ID)
 - interakce je vyvolána nábojem iontu, který působí na ostatní neutrální atomy, a vlivem interakce vznikne v neutrálních částicích indukovaný dipól.

Postup

- Vygenerovali jsme konfiguraci neutrálního klastru
- Vibračně jsme jej excitovali na disociační limitu
- Následně jsme adiabaticky ionizovali tento klastr
- Po té jsme provedli energetickou analýzu



Mdisreader

- Program vyhodnocující velikost fragmentů dle vzdálenostního kritéria (rozpadlé klastry či nerozpadlé) a také umožňuje provést energetickou analýzu jednotlivých velikostí fragmentů
- Momentálně je rozvinut do velikosti fragmentu 13
- V plánu je možnost importu energií pro energetickou analýzu z ini souborů

Energetická analýza

- Se prováděla za pomoci programového balíku Mdisreader
- Principem bylo porovnání vnitřních energií vzniknuvších fragmentů s minimálními energiemi fragmentů, které by vznikly rozpadem.
- Příklad pro pentamer

```
IF (INT_ENERGY_EV >=EN_Rg1p + EN_Rg4) THEN
LOW_TEOR_SIZE=1

ELSE IF (INT_ENERGY_EV >=EN_Rg2p + EN_Rg3) THEN
LOW_TEOR_SIZE=2

ELSE IF (INT_ENERGY_EV >=EN_Rg3p + EN_Rg2) THEN
LOW_TEOR_SIZE=3

ELSE IF (INT_ENERGY_EV >=EN_Rg4p + EN_Rg1) THEN
LOW_TEOR_SIZE=4

ELSE
LOW_TEOR_SIZE=5
```

Předchozí výsledky pro Rg₄

Vzácný plyn	Hladina adiabatické ionizace	Horní odhad nabitých monomerů z EA	Počet monomerů získaných z MD 100ps	Monomerů v experimentu
Ar ₄	L09	100%	55%	56%
	L10	100%	41,4%	
	L11	100%	33,6%	
	L12	100%	86%	
Kr ₄	L09	100%	0,8%	96,1%
	L10	100%	0,2%	
	L11	100%	0,4%	
	L12	100%	6,4%	

Předchozí výsledky pro Rg₄

Vzácný plyn	Hladina adiabatické ionizace	Horní odhad nabitých monomerů z EA	Počet monomerů získaných z MD 100ps	Monomerů v experimentu
Xe ₄	L09	100%	0%	97%
	L10	100%	0%	
	L11	100%	0%	
	L12	100%	0%	

Výsledky pro Rg₅

Vzácný plyn	Hladina adiabatické ionizace	Horní odhad nabitých monomerů z EA	Počet monomerů z MD 10ps (EA)	Monomerů v experimentu
Ar ₅	L11	96,6%	0% (96,4%)	29%
	L12	100%	0% (100%)	
	L13	100%	0,2% (100%)	
	L14	100%	22,2% (100%)	
	L15	100%	56,6% (100%)	
	diab	0% (trimery 100%)	2,6% (2,6%)	

Výsledky pro Rg₅

Vzácný plyn	Hladina adiabatické ionizace	Horní odhad nabitých monomerů z EA	Počet monomerů z MD 10ps (EA)	Monomerů v experimentu
Kr ₅	L11	100%	Počítá se	96,5%
	L12	100%		
	L13	100%		
	L14	100%		
	L15	100%		
	diab	69%	0% (68,4%)	

Výsledky pro Rg₅

Vzácný plyn	Hladina adiabatické ionizace	Horní odhad nabitých monomerů z EA	Počet monomerů z MD 10ps (EA)	Monomerů v experimentu
Xe ₅	L11	100%	0% (100%)	97,5%
	L12	100%	0% (100%)	
	L13	100%	0% (100%)	
	L14	100%	0% (100%)	
	L15	100%	0% (100%)	
	diab	100%	0% (100%)	

Závěr a výhledy

- Pentamery vzácných plynů mají dostatek energie na fragmentaci s produkcí nabitých monomerů
- Chystáme se provést energetickou analýzu i pro větší klastry
- Rozšířit program Mdisreader pro větší klastry

Děkuji za pozornost