

Konkurence procesů se zářivými a nezářivými přechody u klastrů Rg_4^+ , rozvoj balíku Multiscale

Práce vznikla v rámci projektu sgs17/PřF/2012

Autor:

Tomáš Janča

Datum:

11. 6. 2012

Vedoucí projektu:

doc. Ing. Ivan Janeček, CSc.

Obsah

- Úvod
- Multiškálový model
- Časové vzorkování, výsledky, shrnutí
- Programový balík Multiscale
- Rozvoj balíku
- Závěr a výhledy

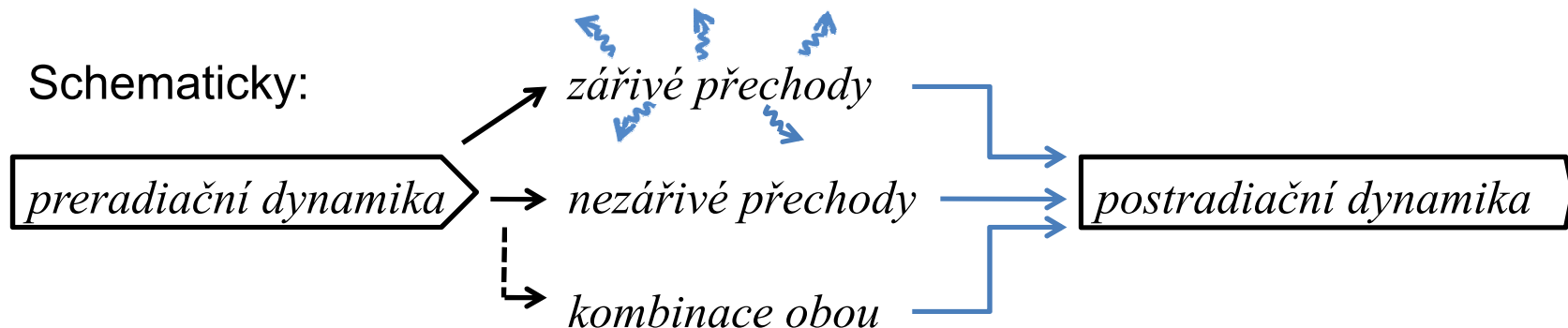
Úvod

- Obecně: teoretické studium fragmentace Rg_4 po náhlé ionizaci
- Výpočetní metody: hemikvantová Mean field dynamika s quenchingem v interakčním modelu DIM + SO + ID-ID
- Dosavadní výsledky:
 - Rg_3^+ – zastoupení nabitých fragmentů v dobré kvalitativní shodě s experimentem
 - Ar_4^+ – zastoupení nabitých fragmentů v dobré kvalitativní shodě s experimentem
 - Kr_4^+ a Xe_4^+ – téměř nefragmentují, zůstávají v metastabilních stavech, dosavadní model selhává
- → příprava studia fragmentace z metastabilních stavů prostřednictvím přechodů na nižší hladiny

Multiškálový model

- Rozšíření dosavadního modelu o zahrnutí vlivu zářivých a nezářivých přechodů (jejich kombinace)
- Princip: klastr v metastabilním stavu přejde na nižší energetickou hladinu → fragmentace

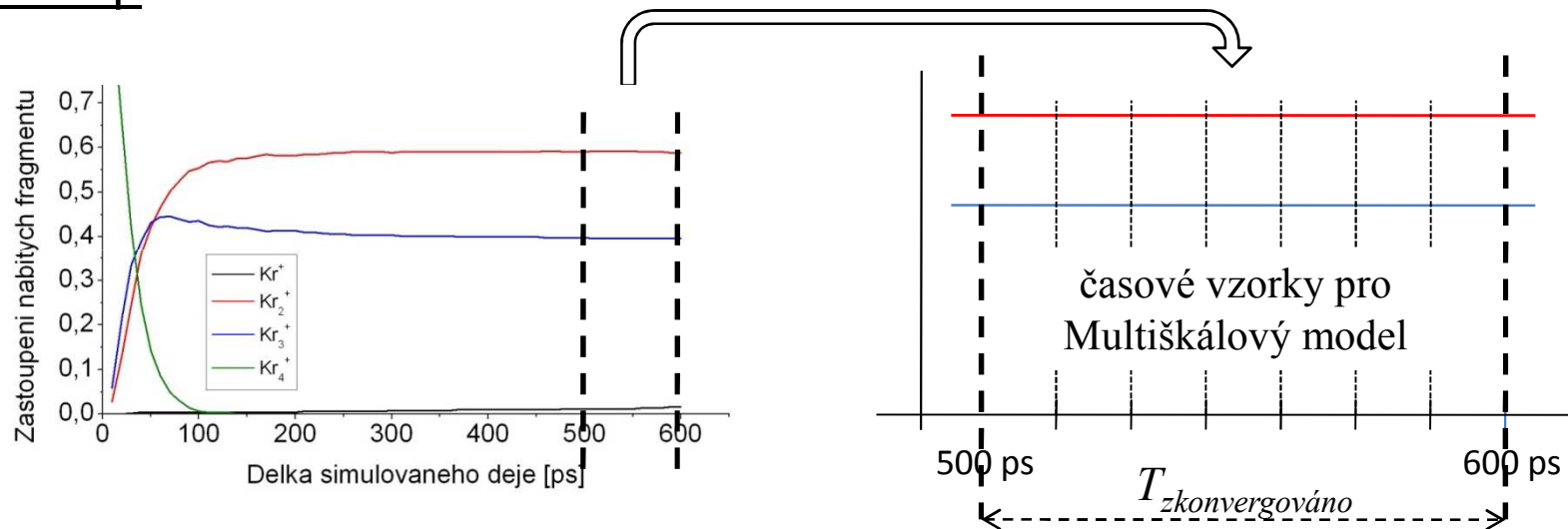
- Schematicky:



- 1. krok:** získání vzorků metastabilních konfigurací (simulace preradiační dynamiky, řádově stovky až tisíce ps)
- 2. krok:** výpočet rychlostí zářivých (nezářivých) vertikálních přechodů na nižší el. hladiny (reálně μs škála)
- 3. krok:** určení velikosti nabitého fragmentu (energetické kritérium X vzdálenostní kritérium z dodatečné $200ps$ simulace postradiační dynamiky)

Časové vzorkování

- Určení zastoupení nabitých fragmentů za použití Multiškálového modelu ze stavů v různých (ale v intervalu již zkonvergovaných) časech preradiační dynamiky
- Princip:



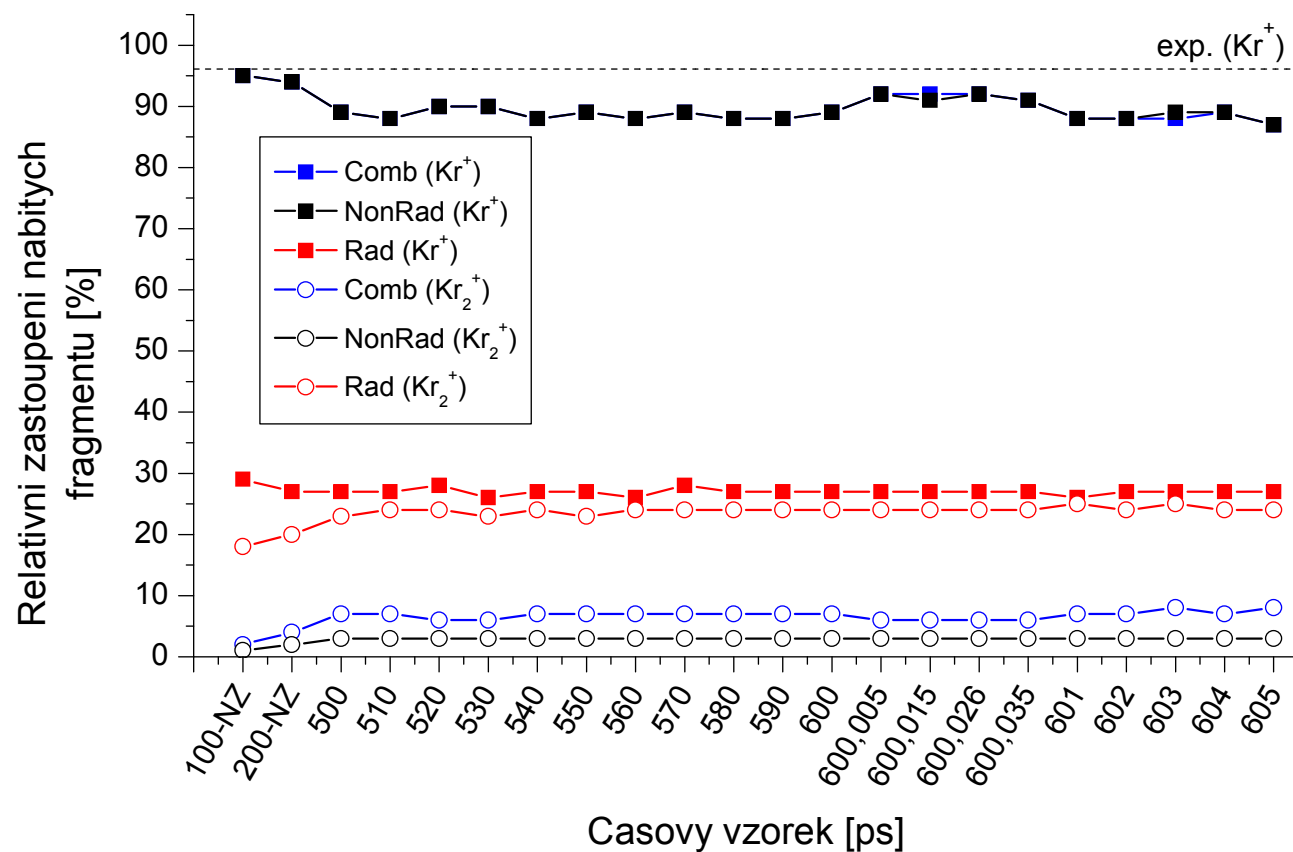
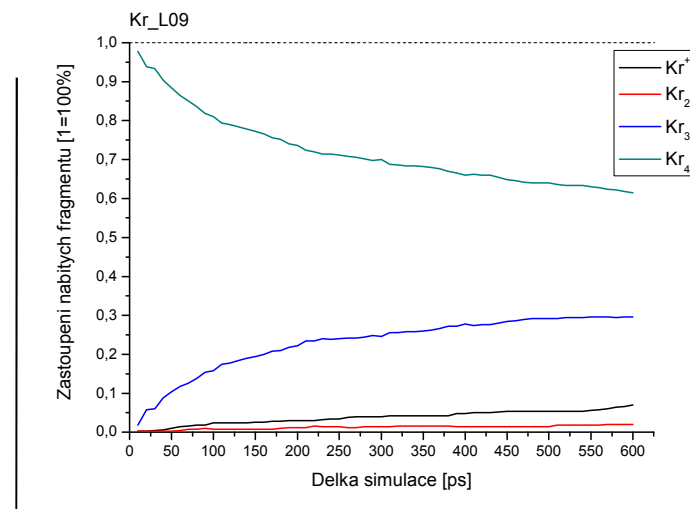
- Účel vzorkování:
 - vykreslit závislost počtu těchto fragmentů na $T_{zkonvergováno}$
 - zjistit, zda závislost nevykazuje nějaký trend
 - určit velikost rozptylu výsledných hodnot
 - zjistit, zda lze vycházet z jednoho „zkonvergovaného“ stavu (malý rozptyl) či zda je potřeba určovat střední hodnotu (velký rozptyl)

Výsledky časového vzorkování

Plyn: **krypton**

Hladina: **L09**

Čas: **1 μ s**

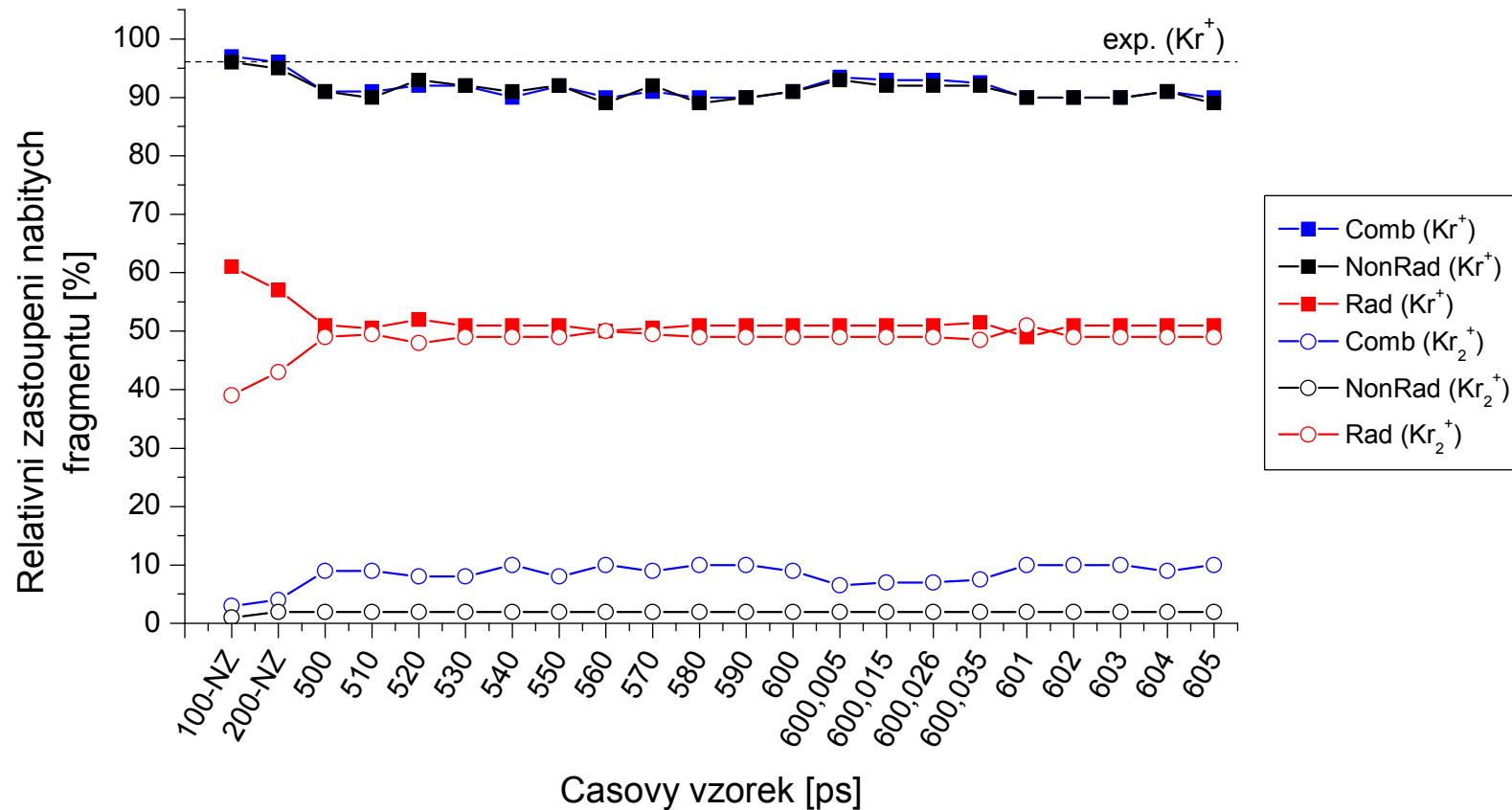
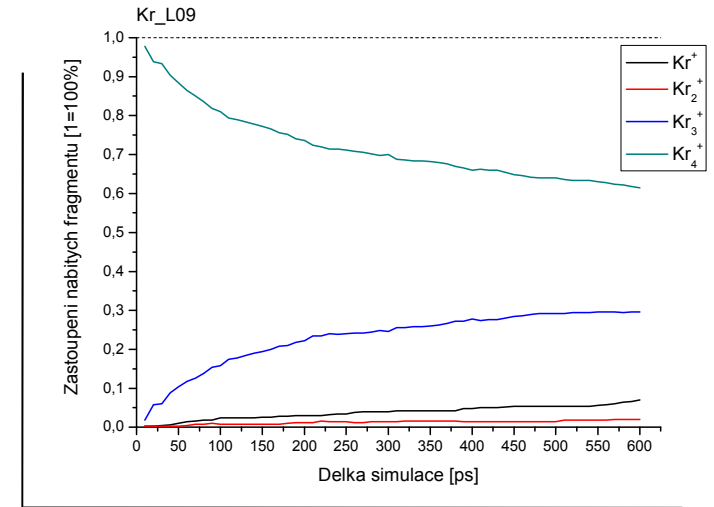


Výsledky časového vzorkování

Plyn: **krypton**

Hladina: **L09**

Čas: $\infty \mu\text{s}$

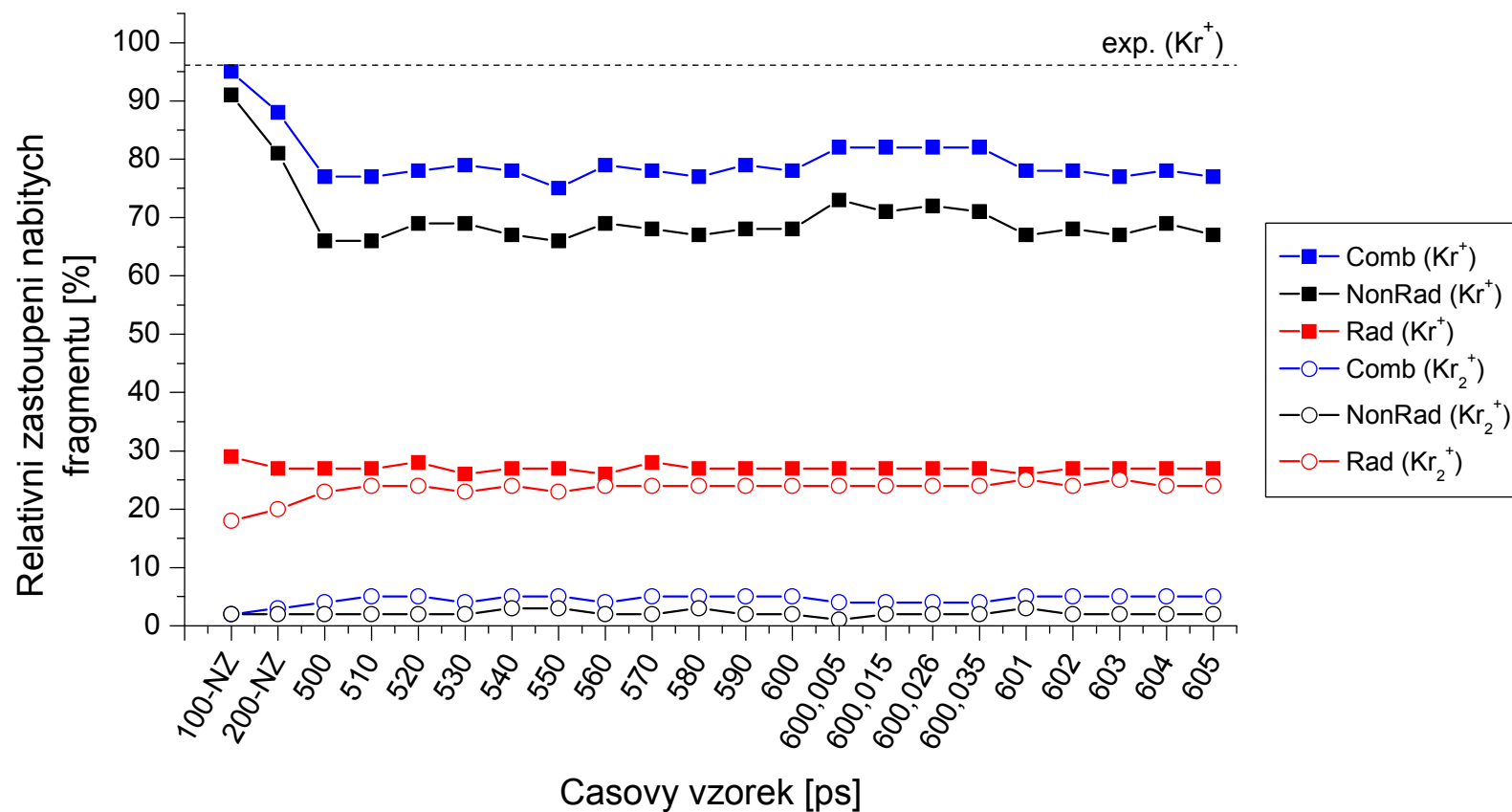
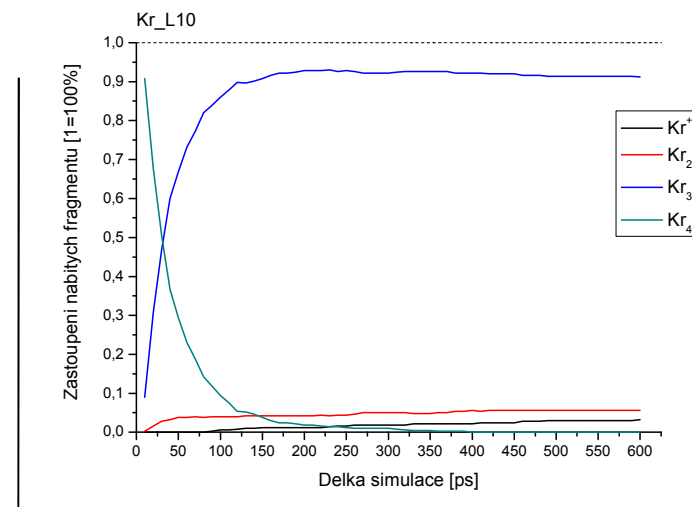


Výsledky časového vzorkování

Plyn: **krypton**

Hladina: L10

Čas: 1 μs

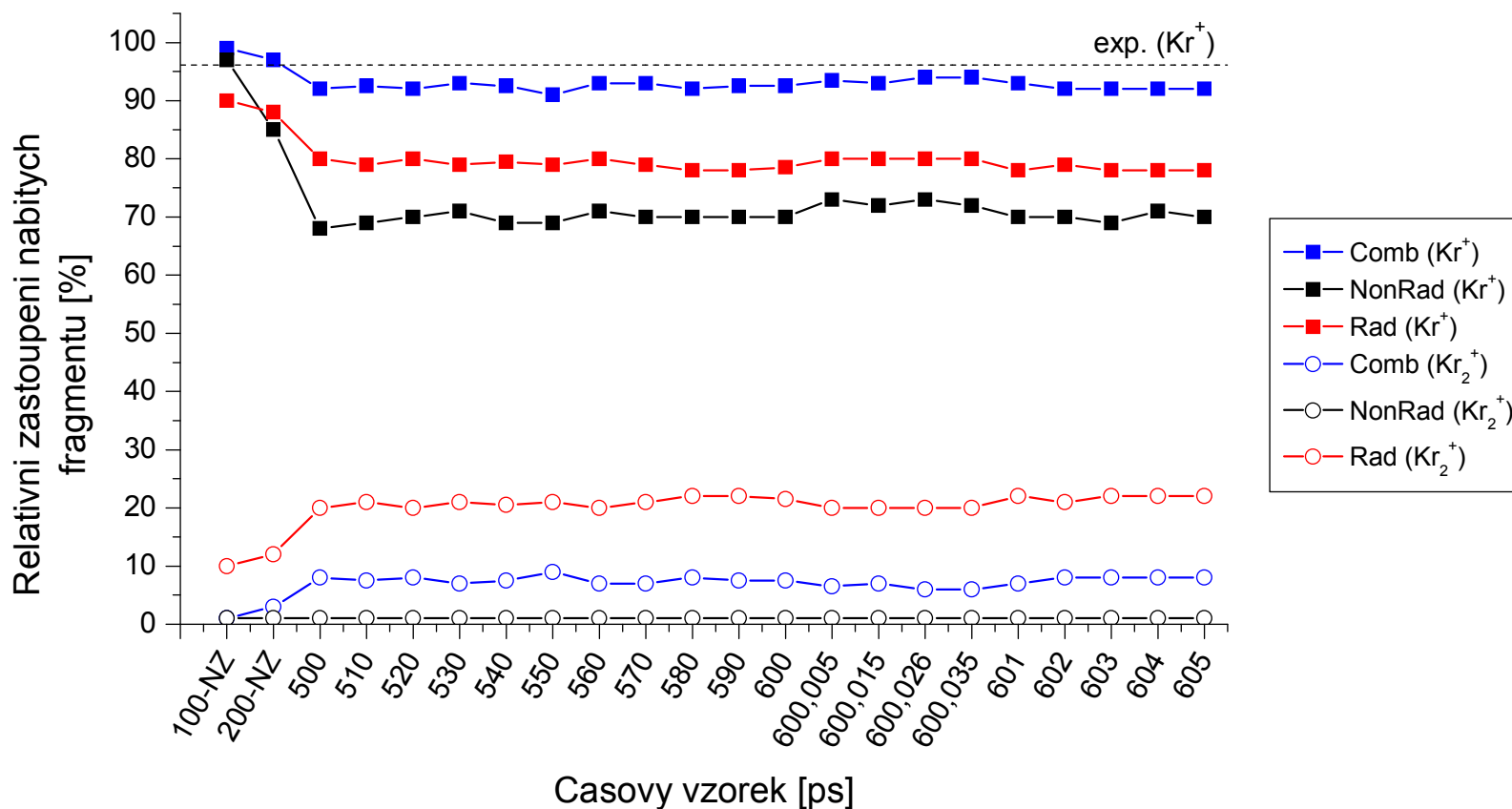
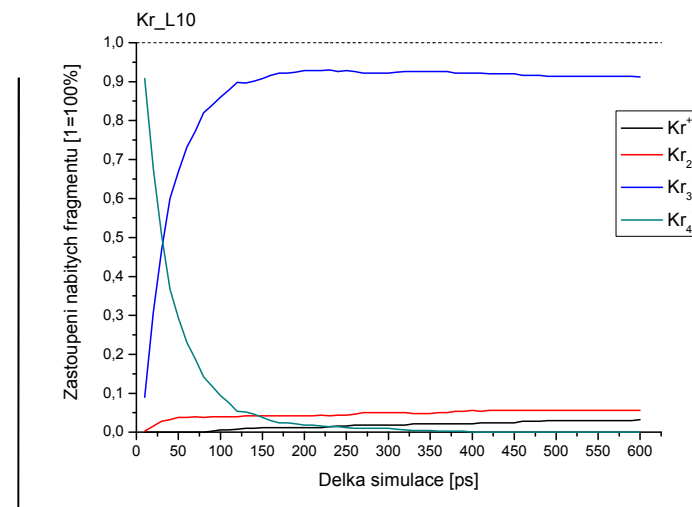


Výsledky časového vzorkování

Plyn: **krypton**

Hladina: **L10**

Čas: $\infty \mu\text{s}$

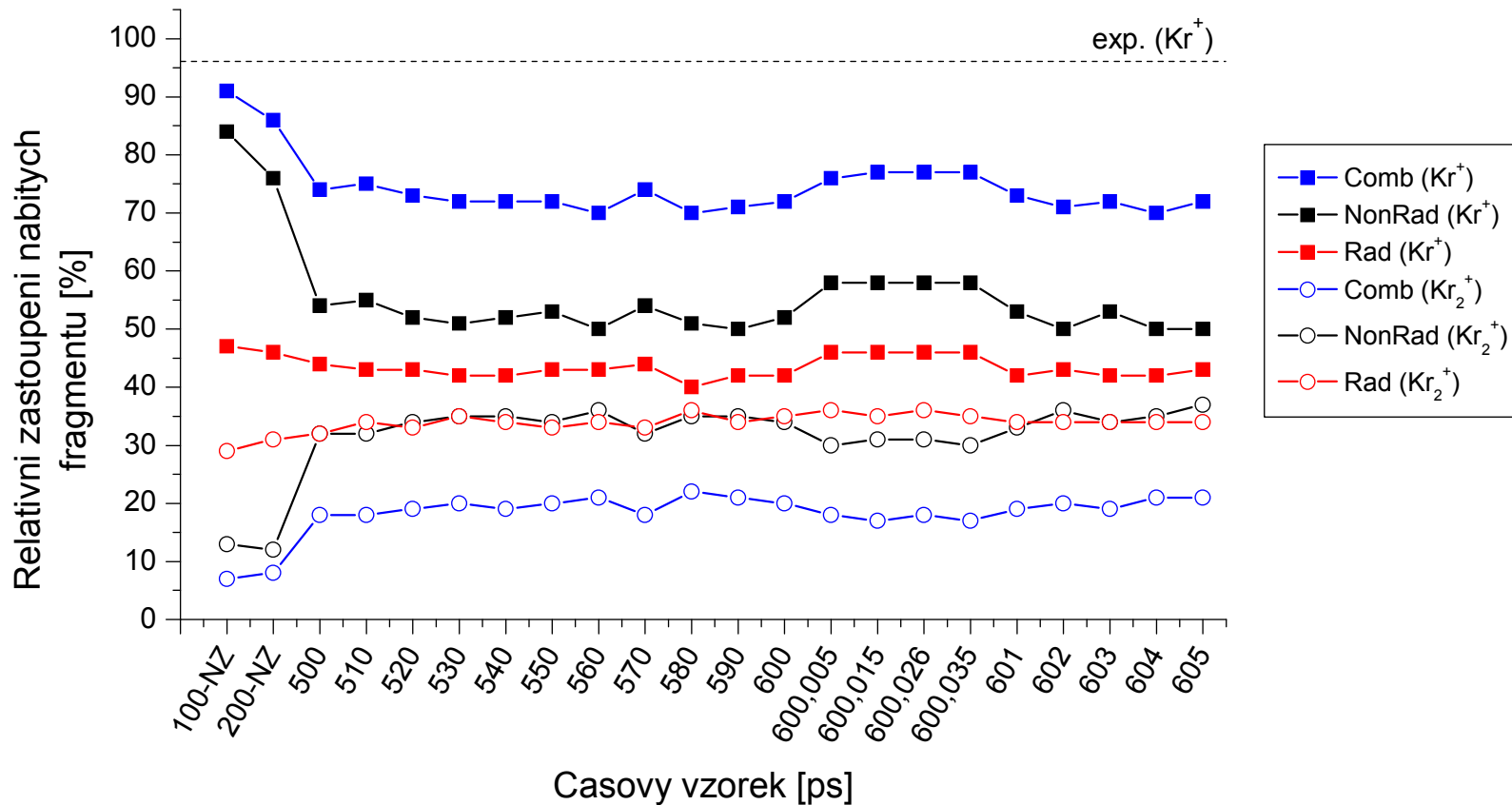
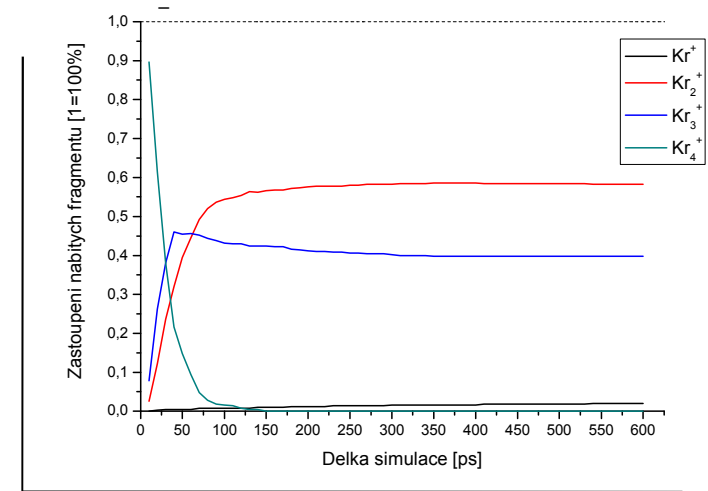


Výsledky časového vzorkování

Plyn: **krypton**

Hladina: L11

Čas: 1 μs

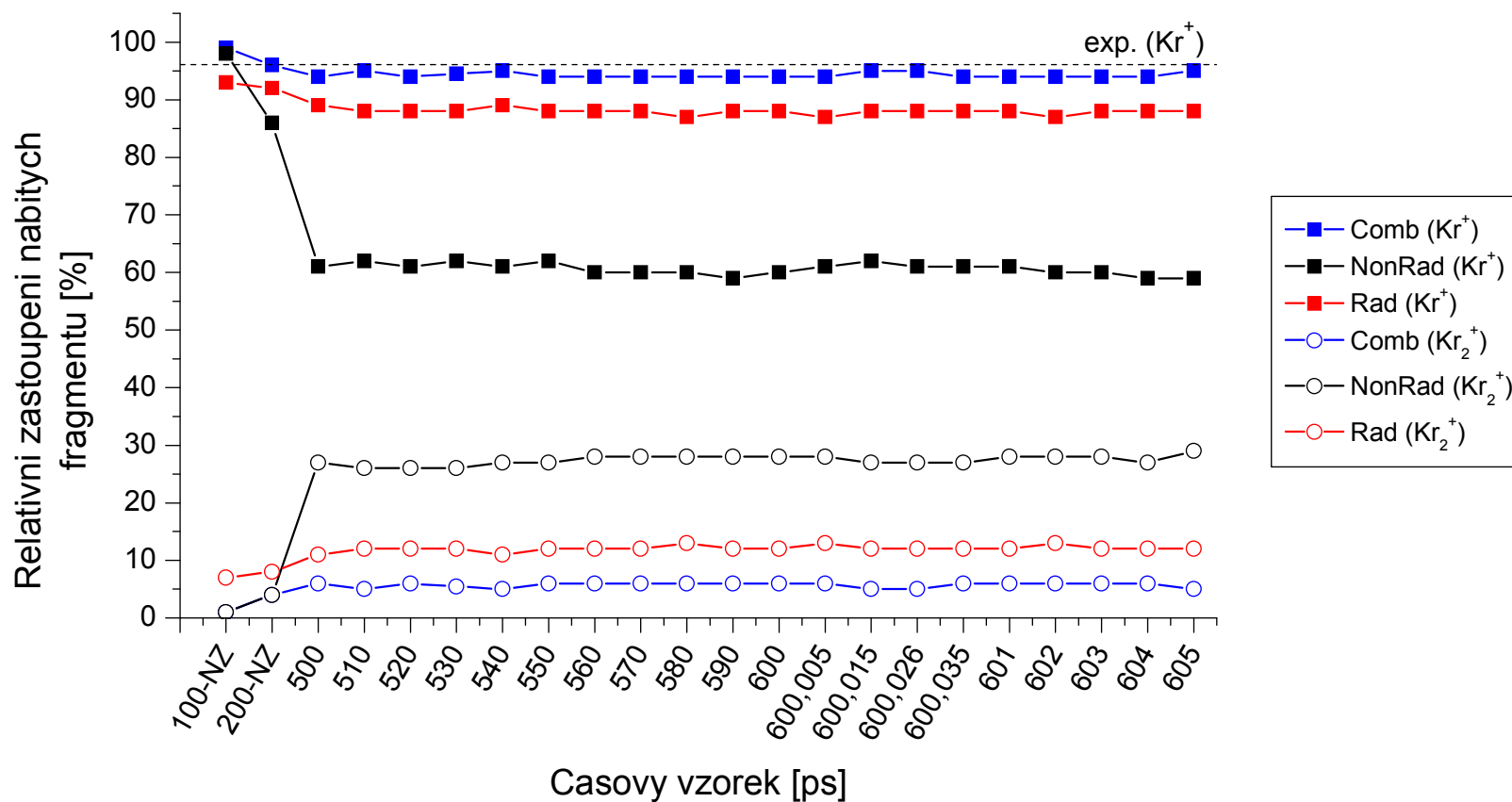
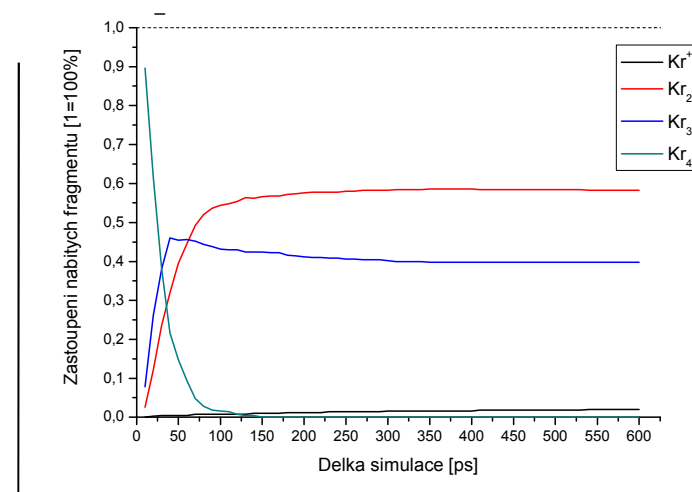


Výsledky časového vzorkování

Plyn: **krypton**

Hladina: L11

Čas: $\infty \mu\text{s}$

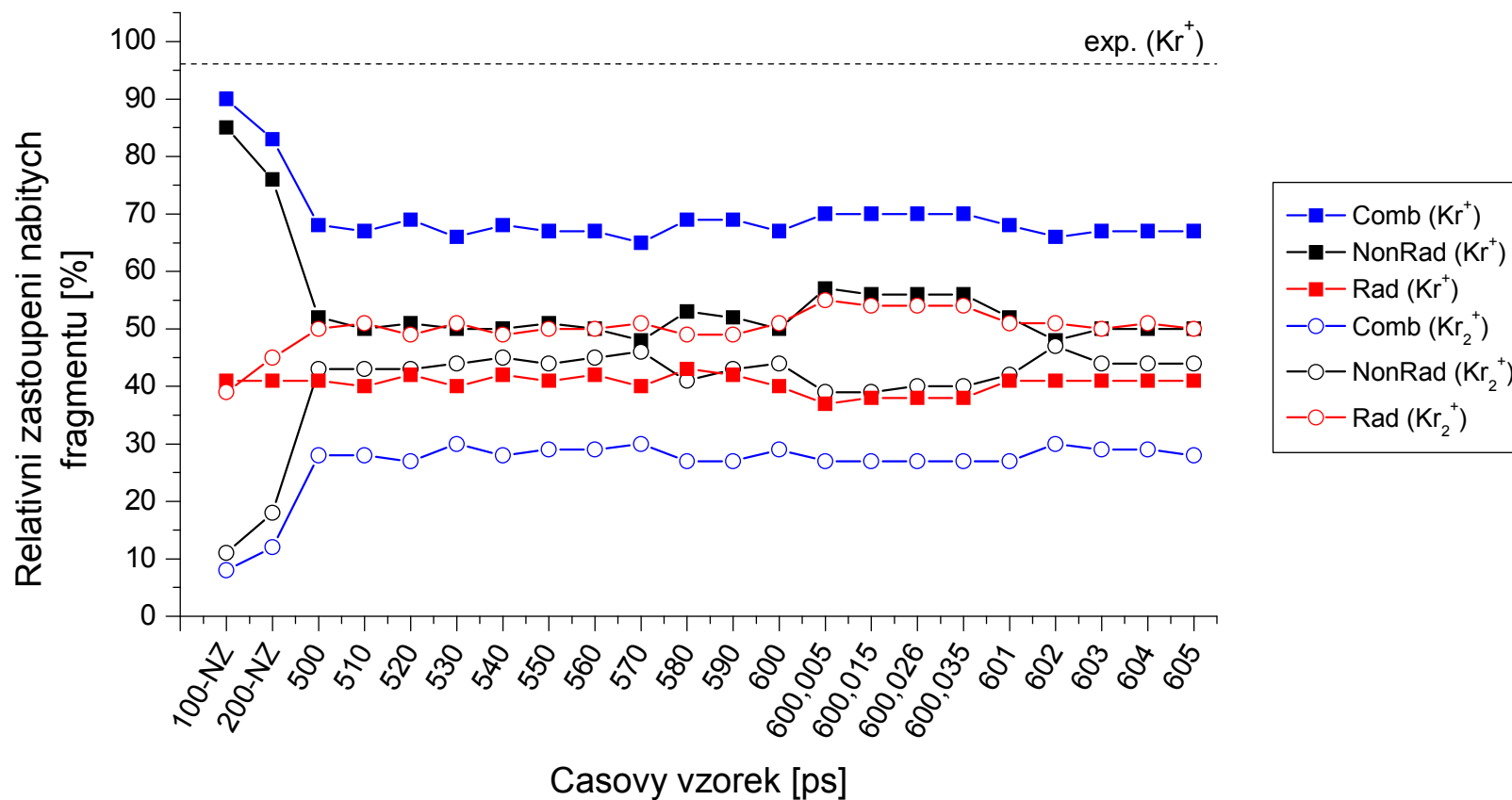
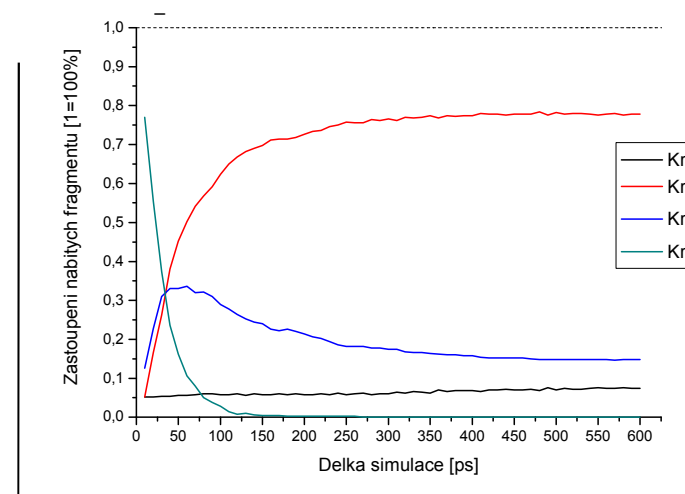


Výsledky časového vzorkování

Plyn: **krypton**

Hladina: **L12**

Čas: **1 μ s**

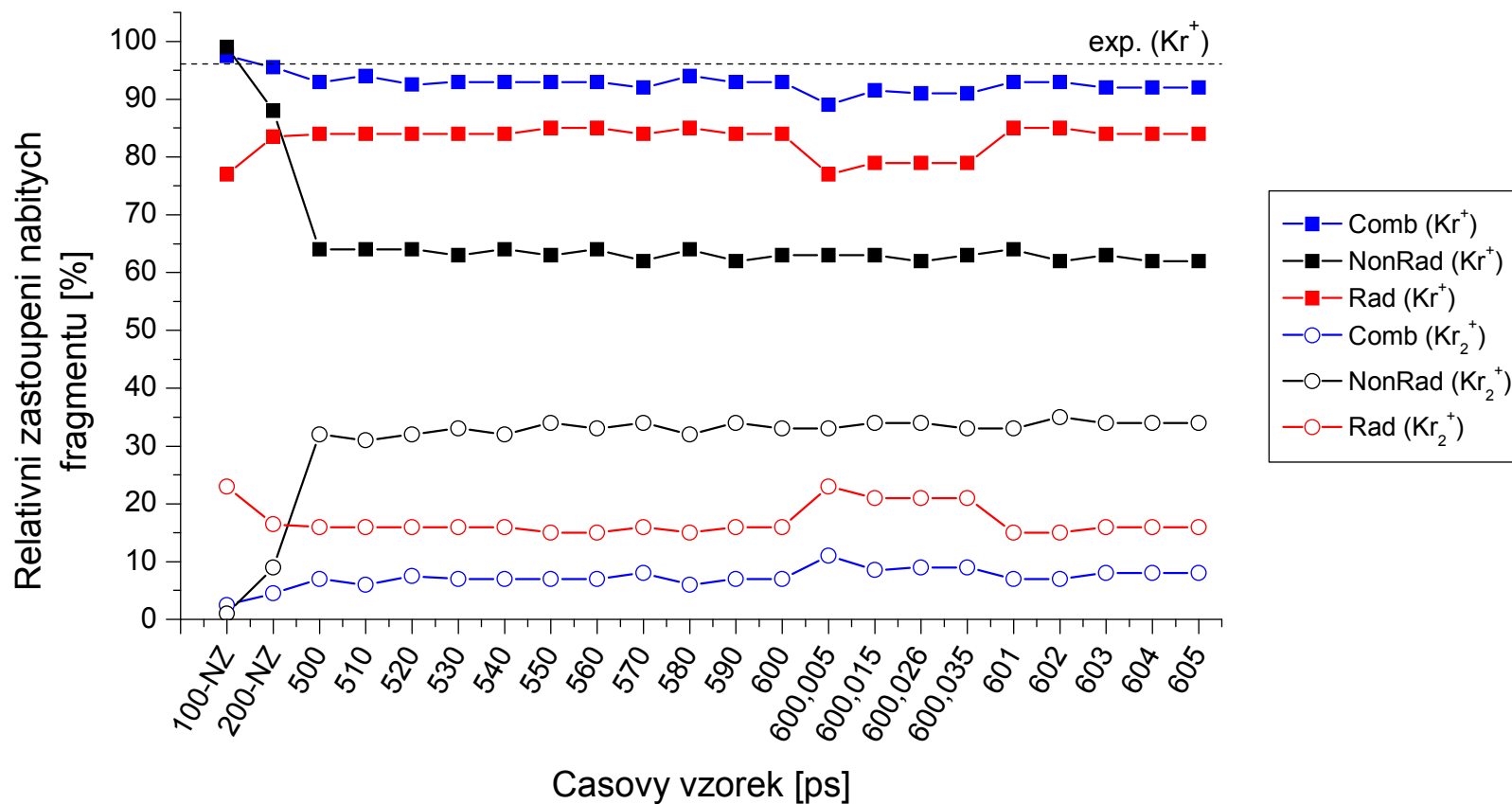
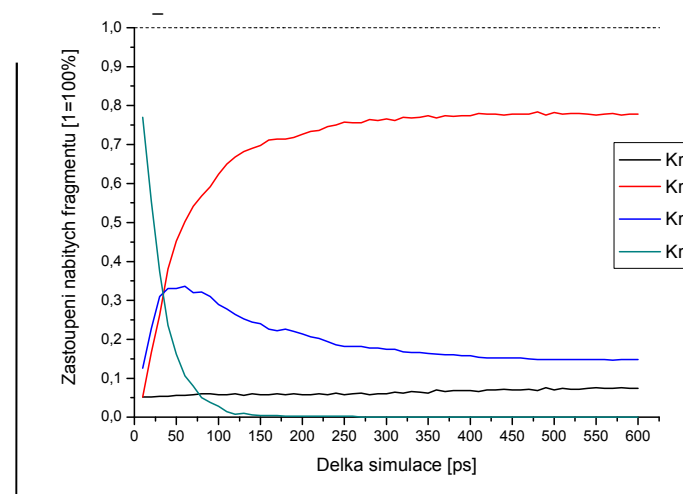


Výsledky časového vzorkování

Plyn: **krypton**

Hladina: **L12**

Čas: $\infty \mu\text{s}$

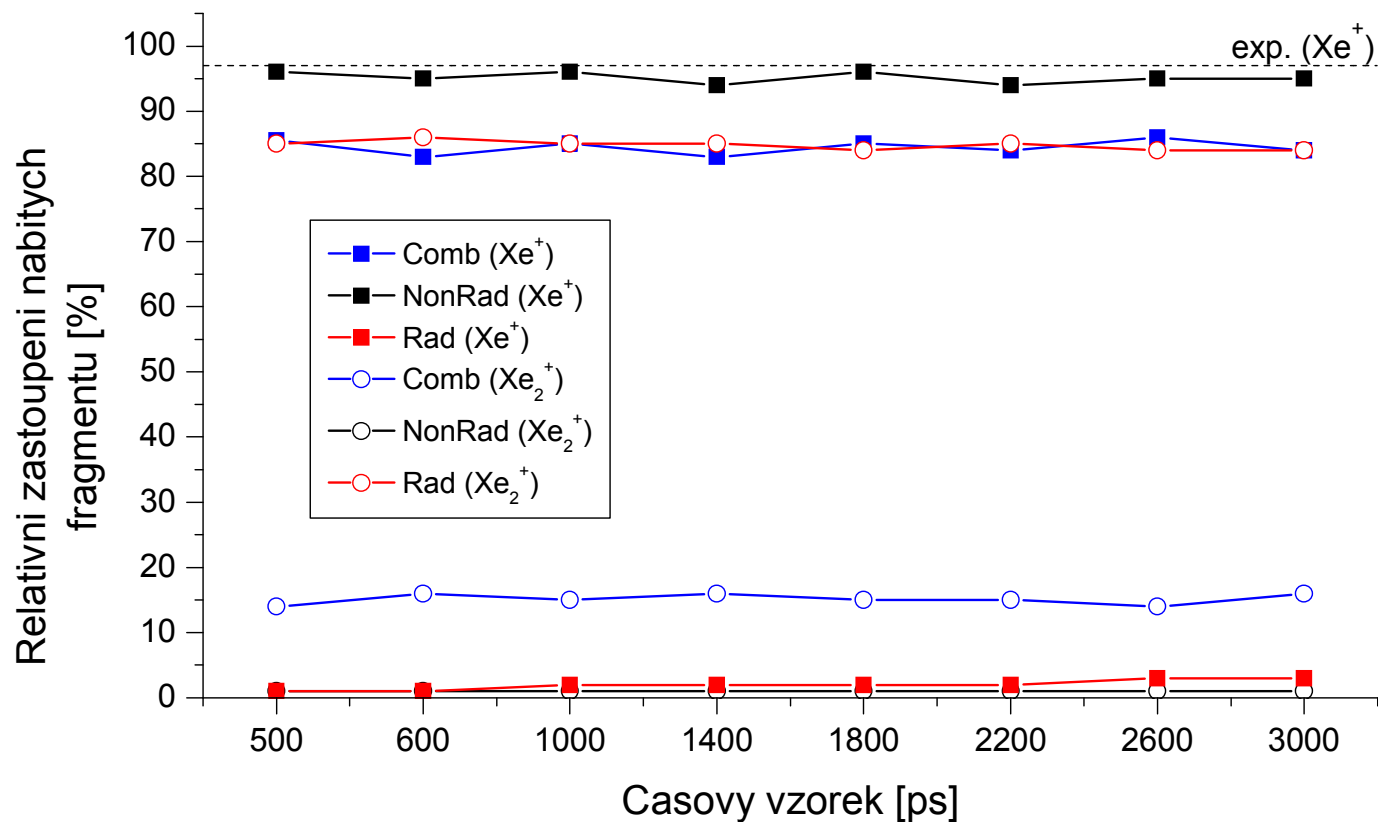
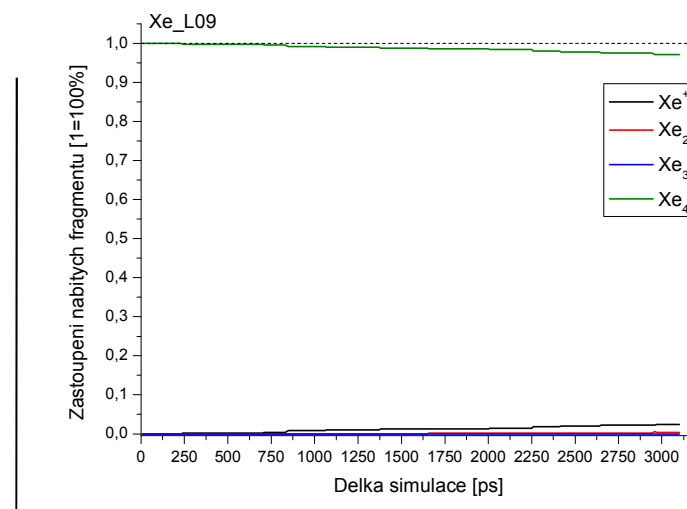


Výsledky časového vzorkování

Plyn: **xenon**

Hladina: **L09**

Čas: **1 μ s**

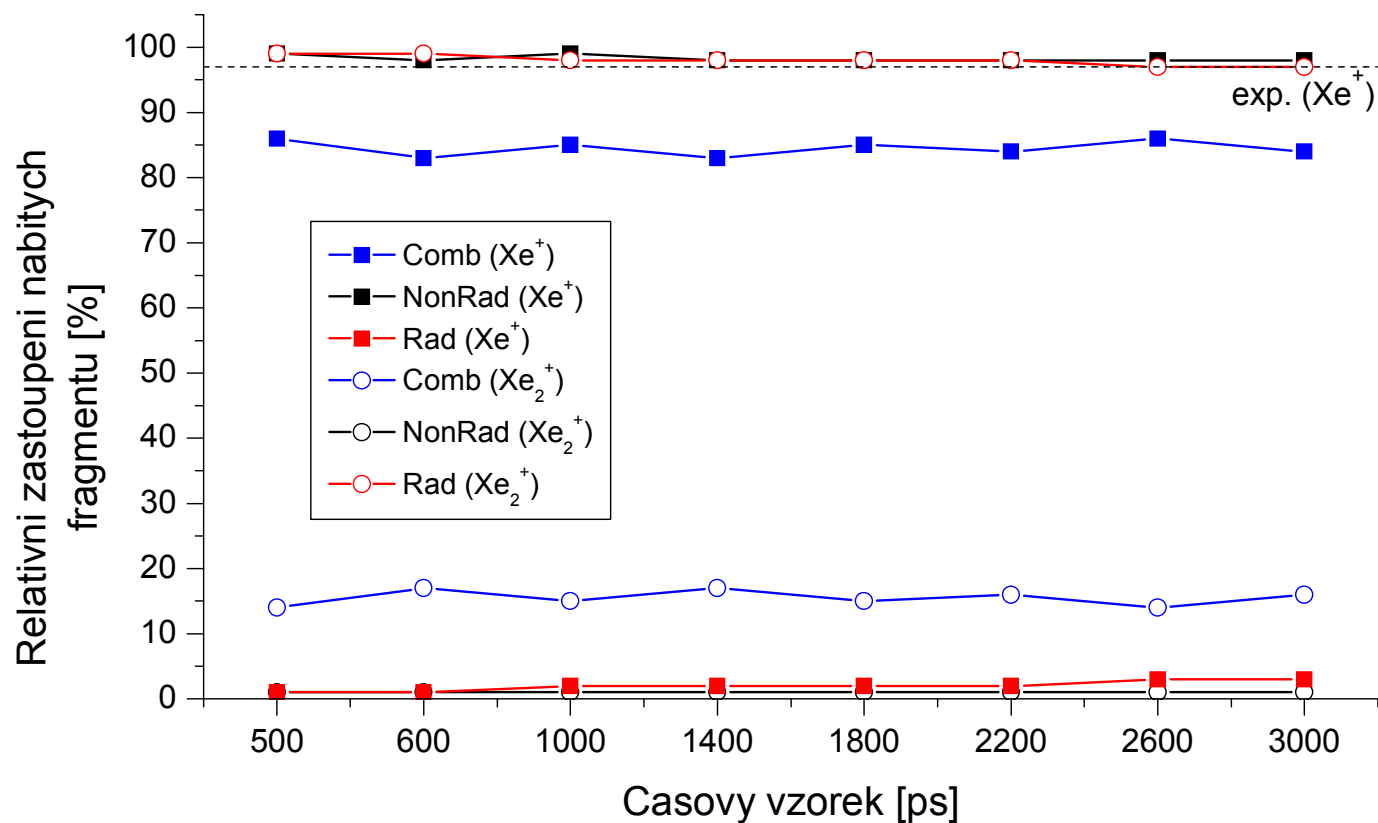
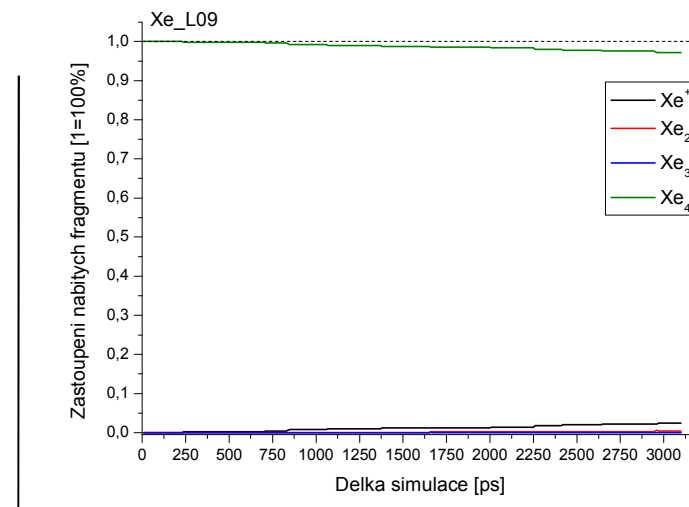


Výsledky časového vzorkování

Plyn: **xenon**

Hladina: **L09**

Čas: $\infty \mu\text{s}$

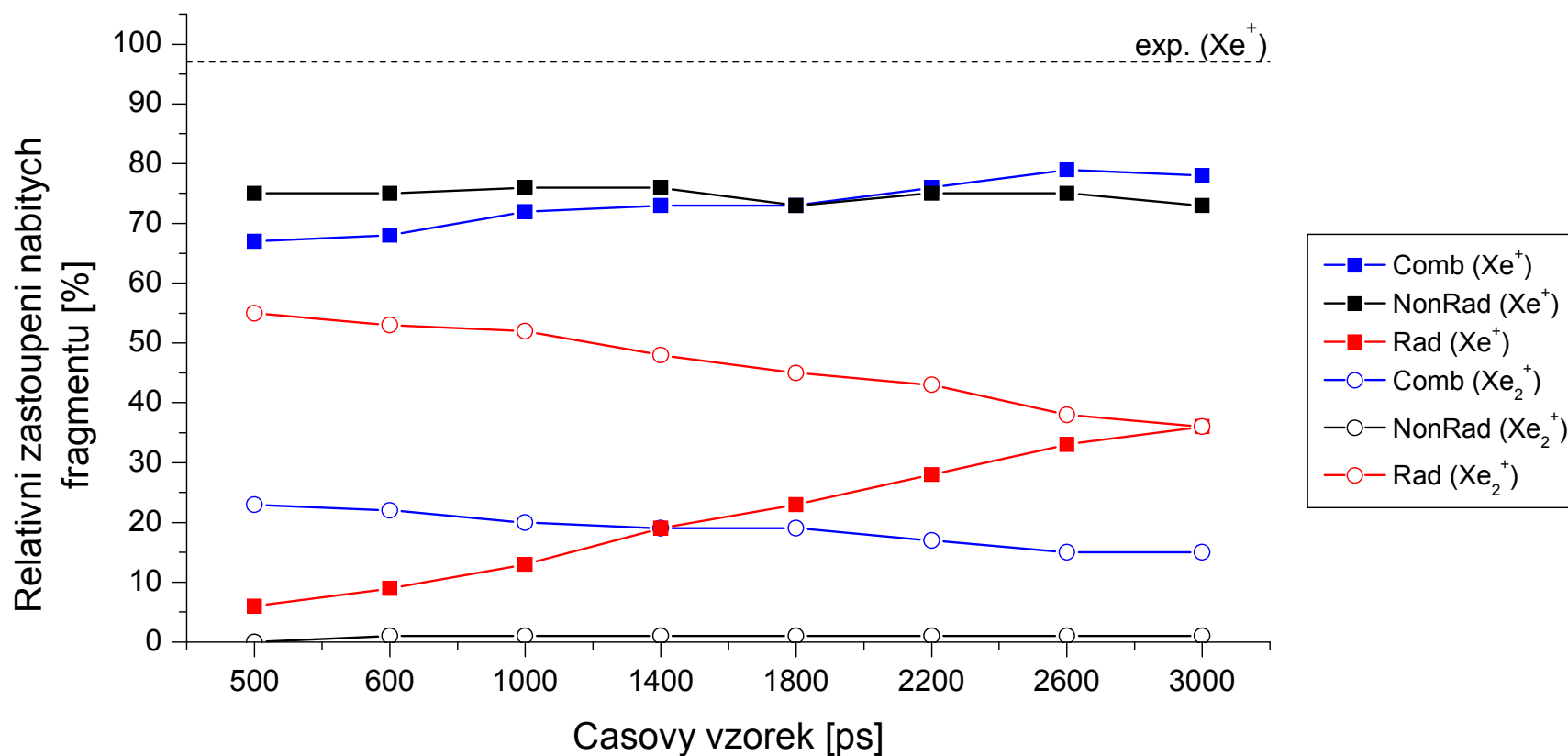
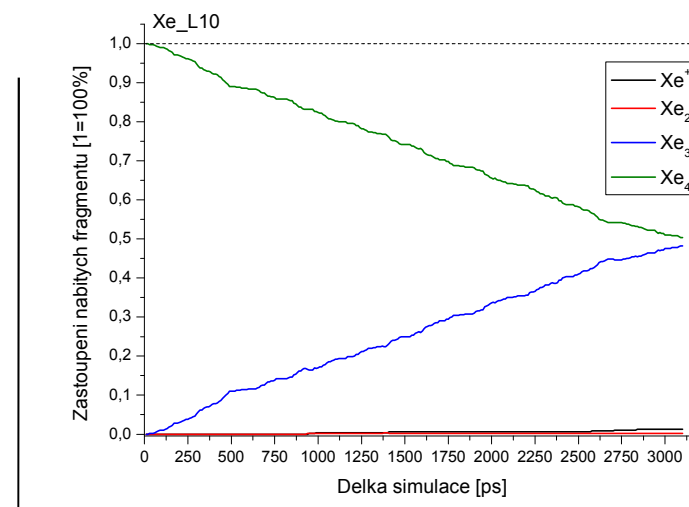


Výsledky časového vzorkování

Plyn: **xenon**

Hladina: **L10**

Čas: **1 μ s**

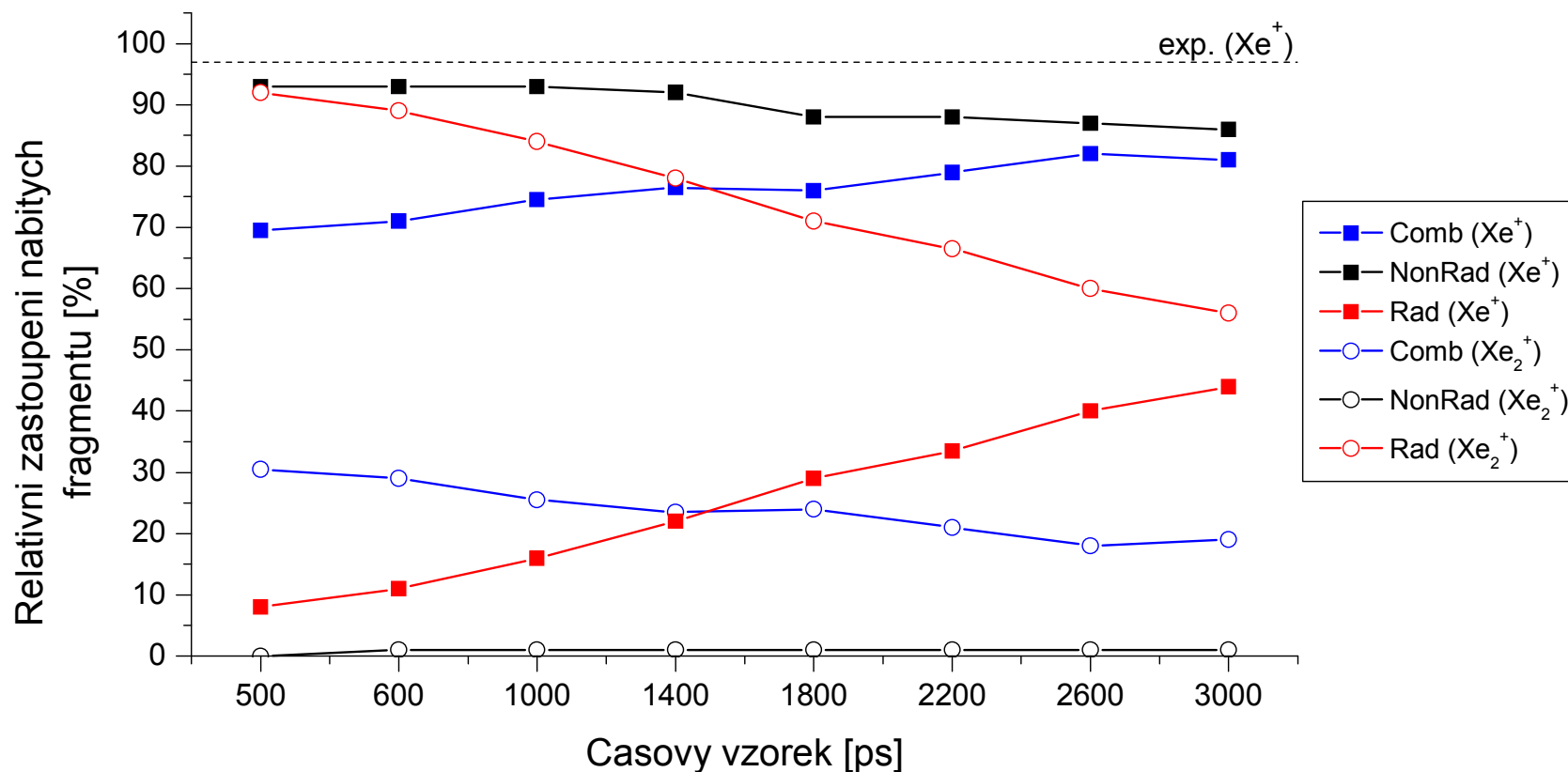
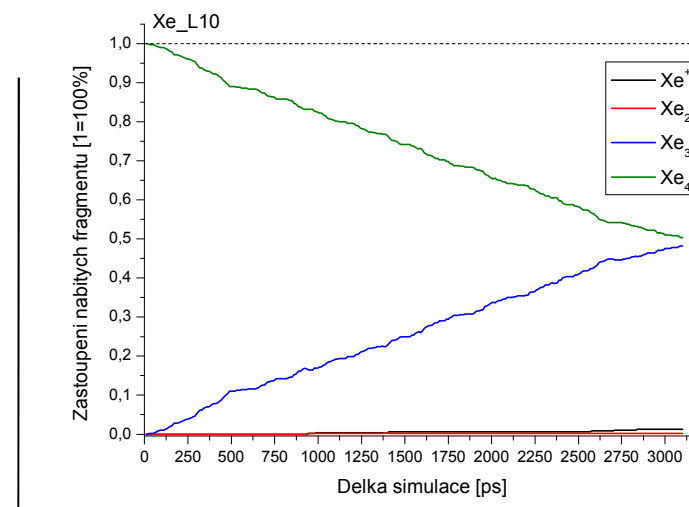


Výsledky časového vzorkování

Plyn: **xenon**

Hladina: **L10**

Čas: $\infty \mu\text{s}$

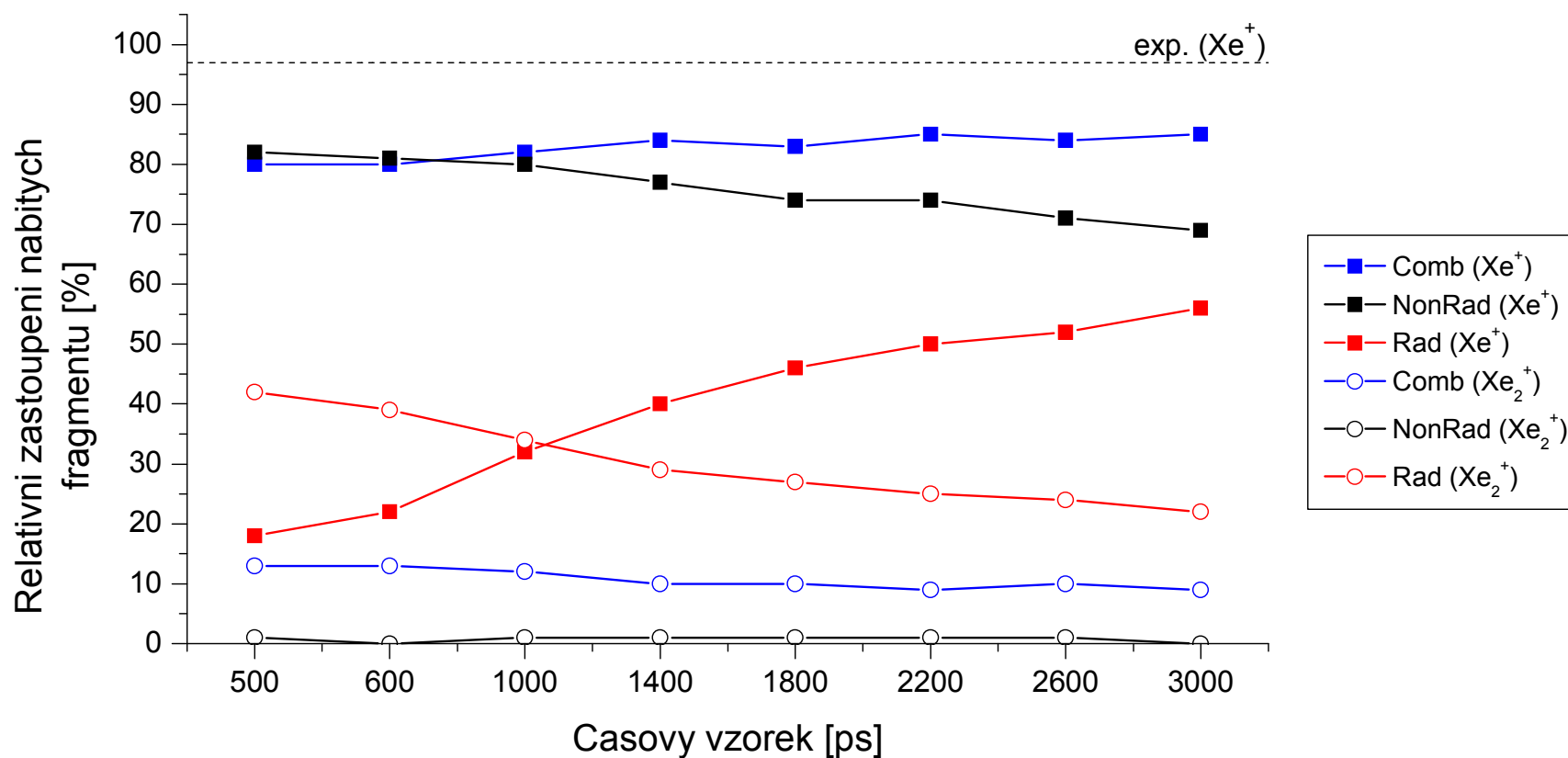
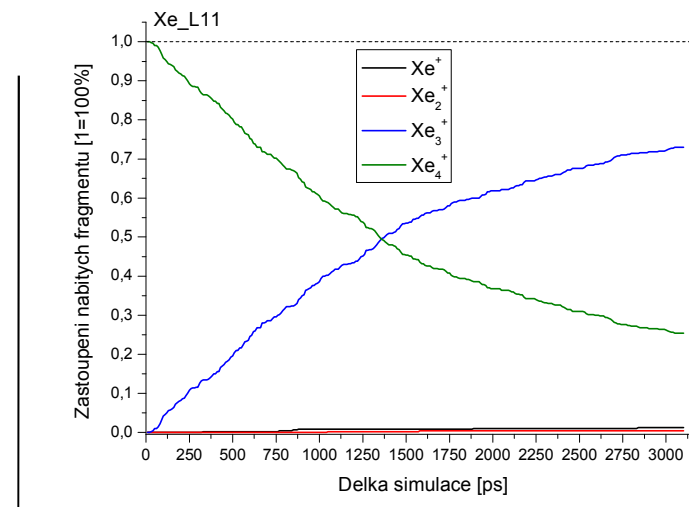


Výsledky časového vzorkování

Plyn: **xenon**

Hladina: **L11**

Čas: **1 μ s**

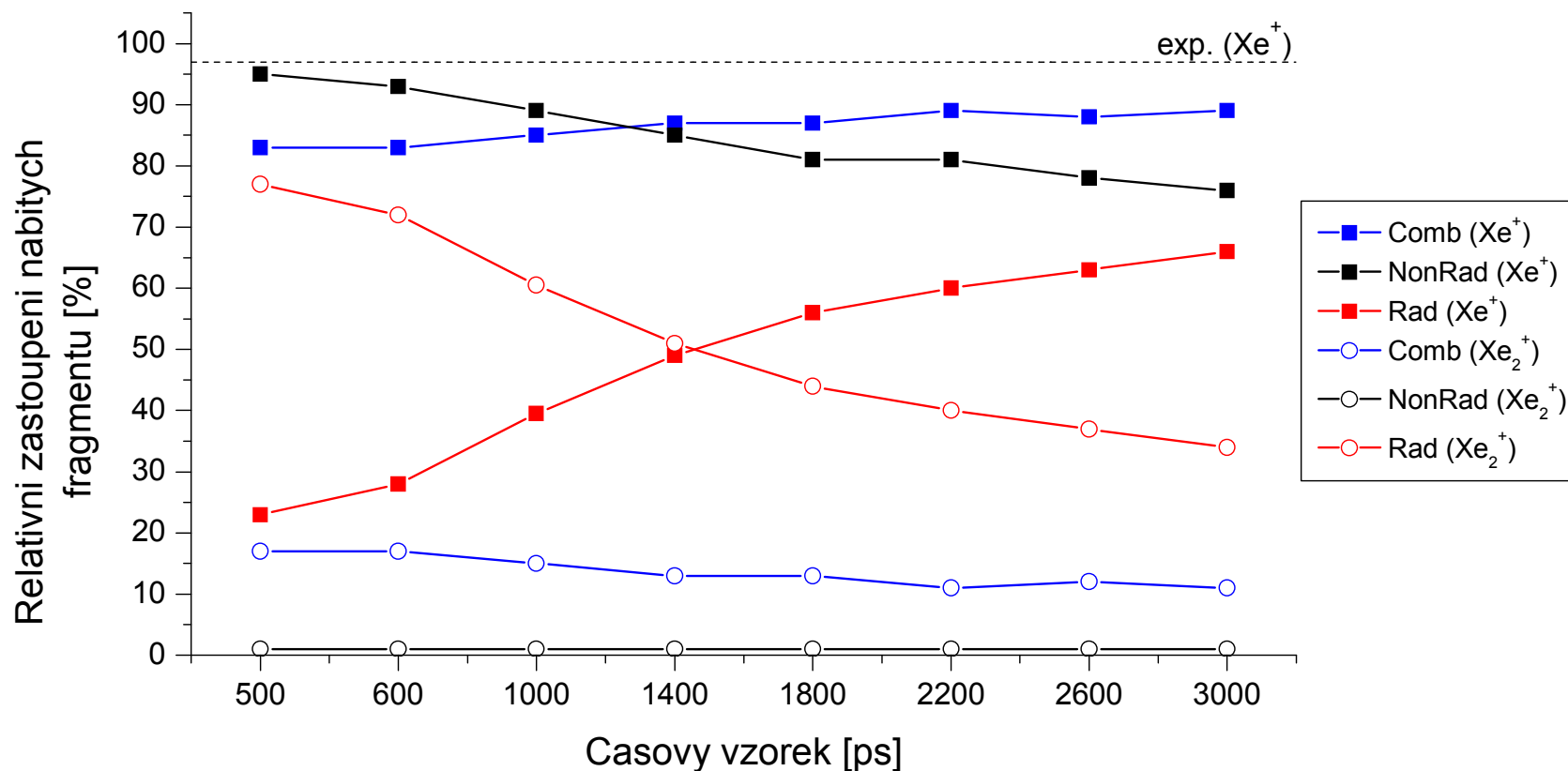
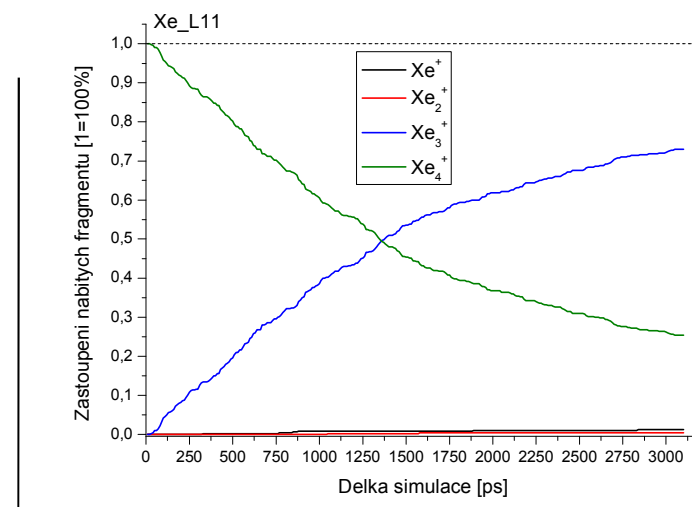


Výsledky časového vzorkování

Plyn: **xenon**

Hladina: **L11**

Čas: $\infty \mu\text{s}$

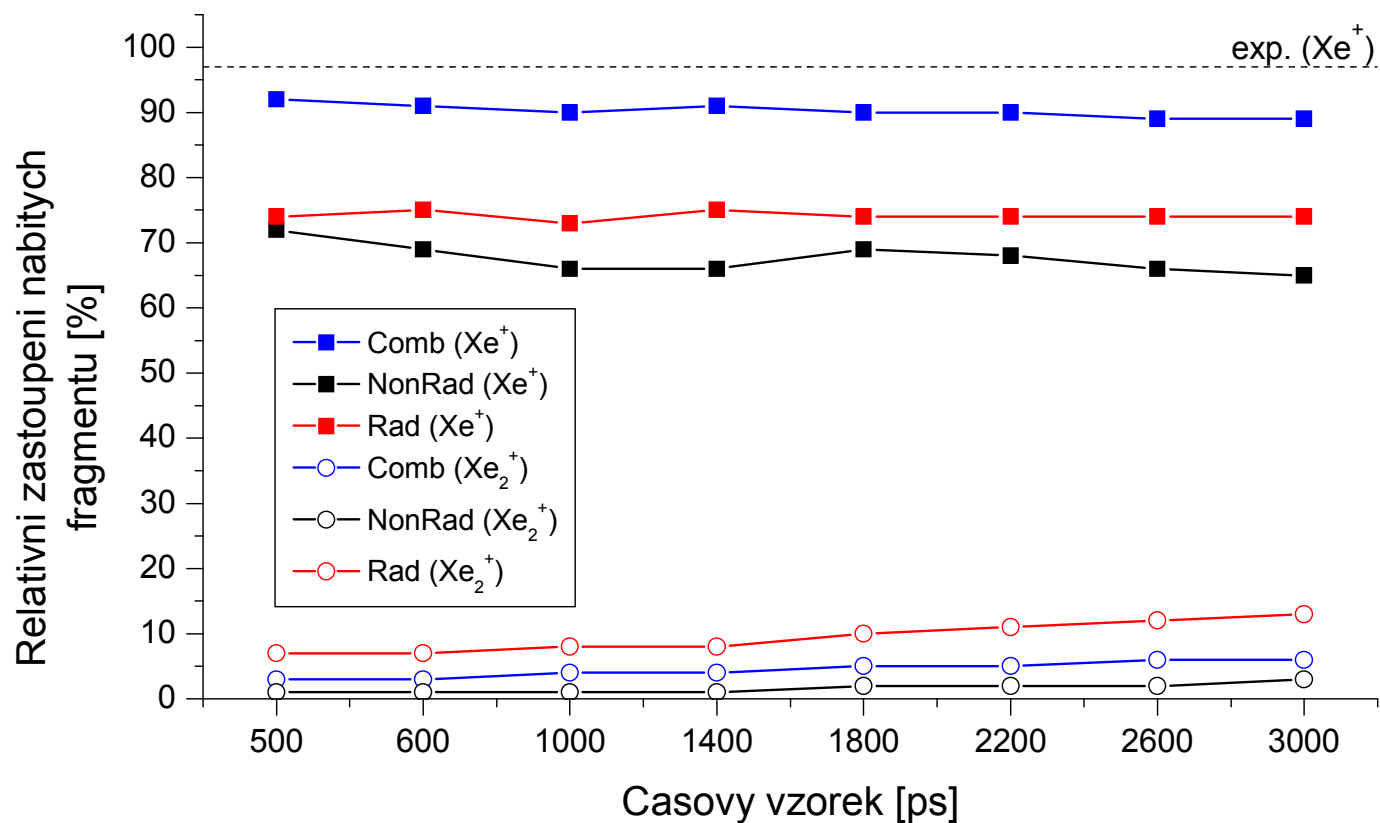
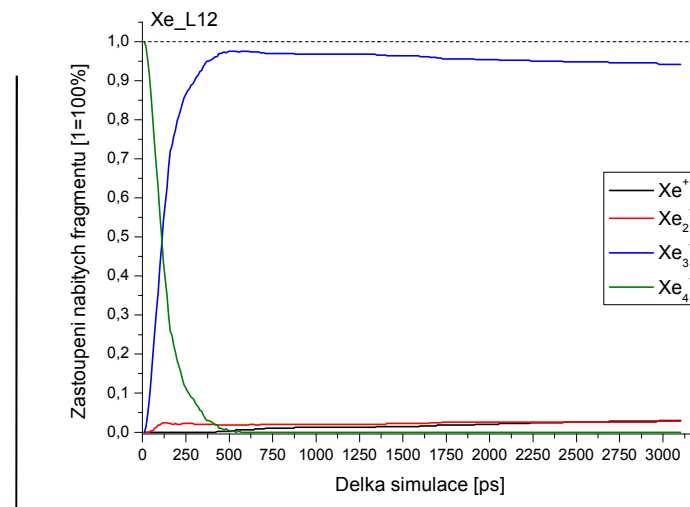


Výsledky časového vzorkování

Plyn: **xenon**

Hladina: **L12**

Čas: **1 μ s**

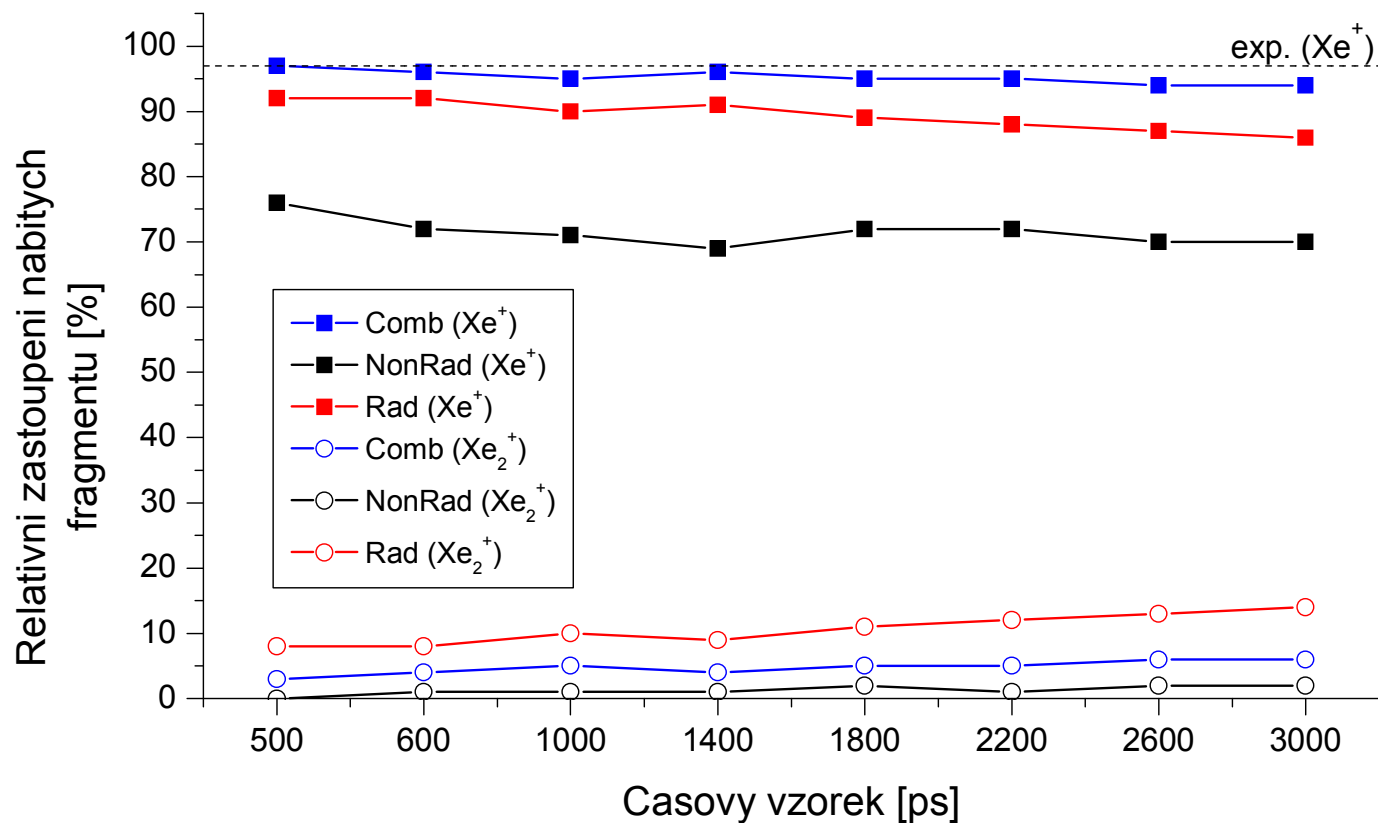
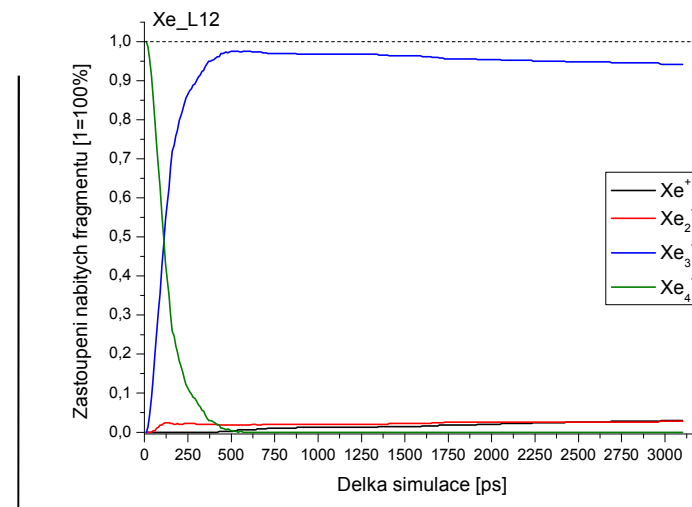


Výsledky časového vzorkování

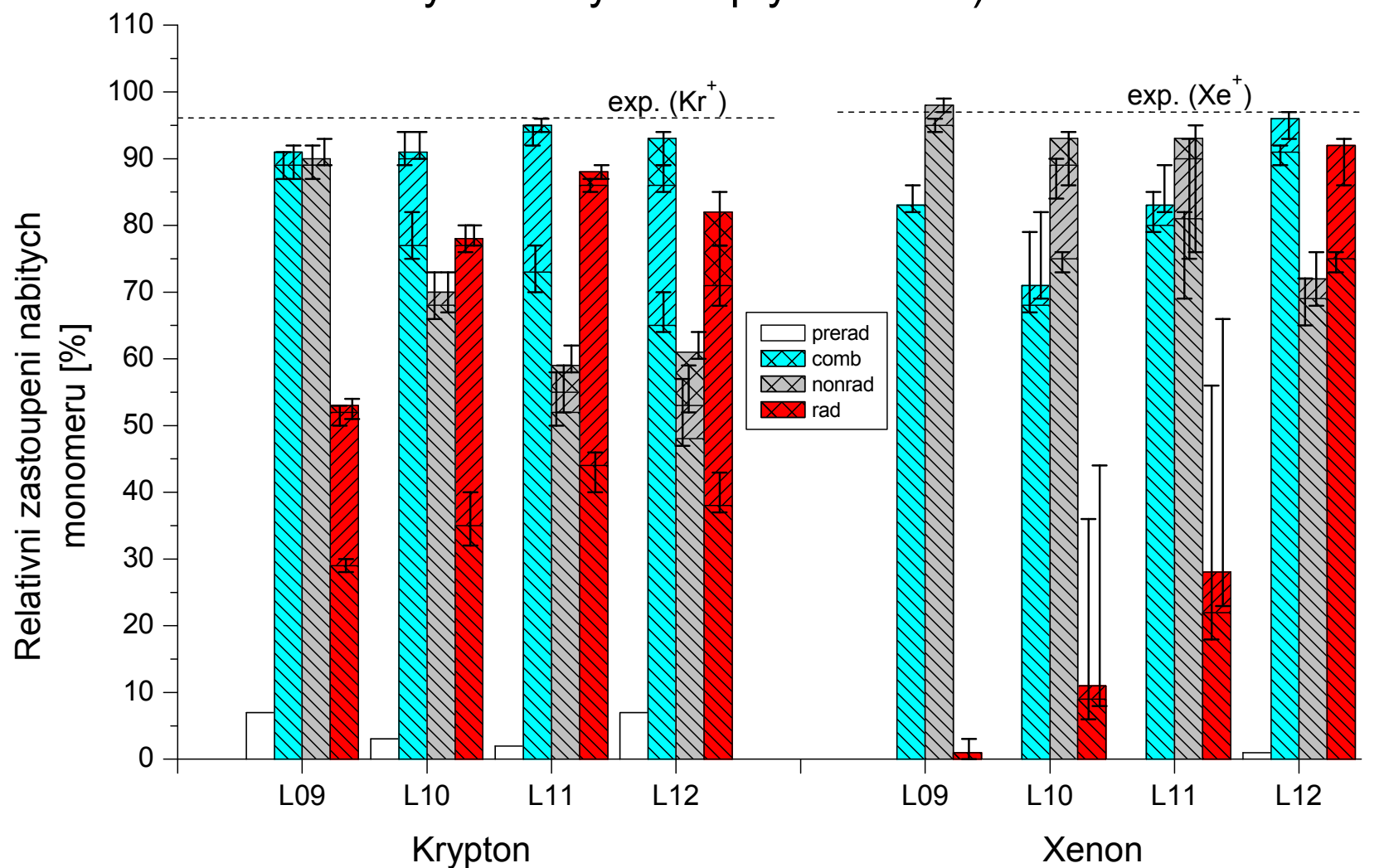
Plyn: **xenon**

Hladina: **L12**

Čas: $\infty \mu\text{s}$



Shrnutí výsledků vzorkování – zastoupení nabitých monomerů z Multiscale modelu ze stavu při 600 ps preradiační dynamiky (včetně vyznačených rozptylů hodnot)



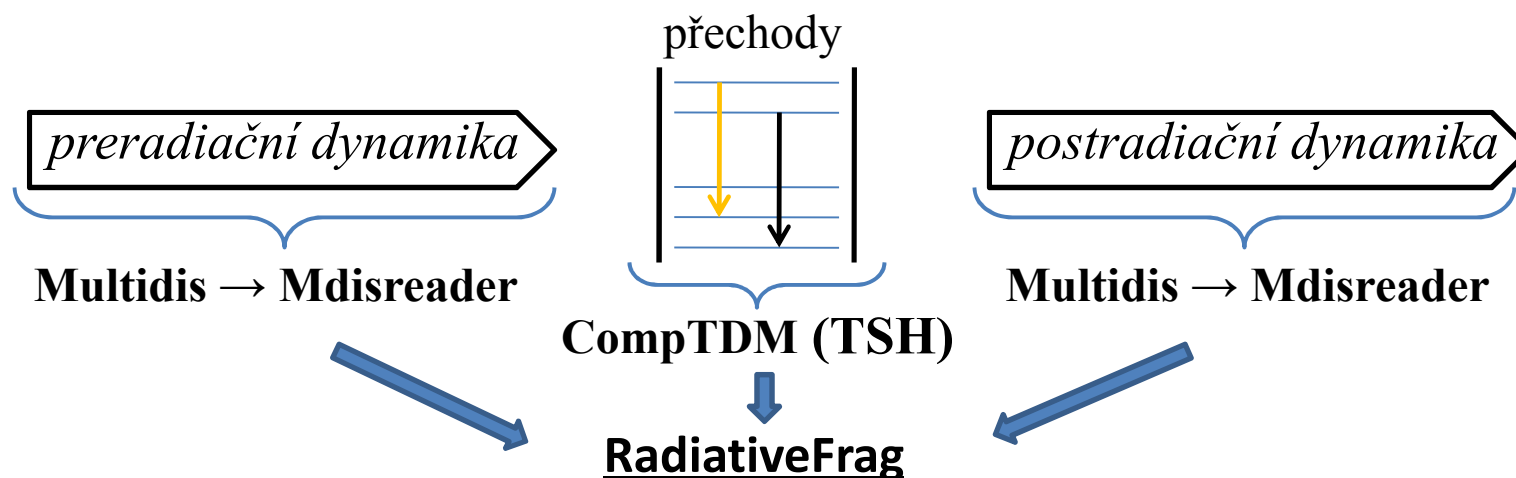
\\ \\ \\ ... stav při 1 μs ;

/// /// ...stav při 10 μs ;

XX ... stav při $\infty \mu s$

Programový balík Multiscale

- Programový balík Multiscale:
 - Multidis (*simulace molekulární dynamiky*)
 - Mdisreader (*teoretické a „simulované“ zastoupení nabitých fragmentů z dynamiky*)
 - CompTDM (*pravděpodobnosti zářivých přechodů*)
 - CompTSH (*pravděpodobnosti nezářivých přechodů*)
 - RadiativeFrag (*časové závislosti zastoupení nabitých fragmentů v rámci Multiscale modelu*)



Rozvoj balíku

- CompTDM, CompTSH:
 - Načtení názvu vstupního souboru
- RadiativeFrag:
 - **Hotovo**: načítání dat z *.ini souboru – typ plynu (Ar, Kr, Xe), počet jader klastru, počet trajektorií, switche pro volbu typu přechodů (jen zářivé, jen nezářivé, kombinace)
 - **Plánováno**: úprava části programu pro určení adiabatického stavu

Závěr

- Pomocí Multiscale modelu, zahrnujícího do simulací přechody systému na nižší elektronové hladiny, získána poměrně dobrá shoda s výsledky reálného experimentu (dominance nabitých monomerů)
- Přesnost výsledků modelu závisí na míře zkonvergovanosti vstupních dat

Výhledy

- Započtení přechodů na všechny nižší hladiny (i z horní skupiny)
- Započtení nezářivých přechodů i na vyšší hladiny
- Použití modelu na Ar_4

Děkuji za pozornost

Zdroje

- [1.] BONHOMMEAU, D.; HALBERSTADT, N.; BUCK, U. *International Reviews in Physical Chemistry*. 2007, volume 26, article no. 21.
- [2.] JANEČEK, I., et. al. *Multiscale non-adiabatic dynamics with radiative decay, case study on the post-ionization fragmentation of rare-gas tetramers*. *EPL*, 98 (2012) 33001.
- [3.] JANEČEK, I., et. al. *Journal of Chemical Physics*. 2009, volume 131, article no. 114306.
- [4.] JANEČEK, I., et. al. *Multiscale non-adiabatic dynamics with radiative decay, case study on the post-ionization fragmentation of rare-gas tetramers*. 2012- [cit. 25. března 2012]. Dostupné na Internetu: <http://arxiv.org/pdf/1202.3846v2.pdf>.