Modelování srážek iontů v počátečních adiabatických stavech s trimery vzácných plynů

(v rámci projektu Otevřená věda III)

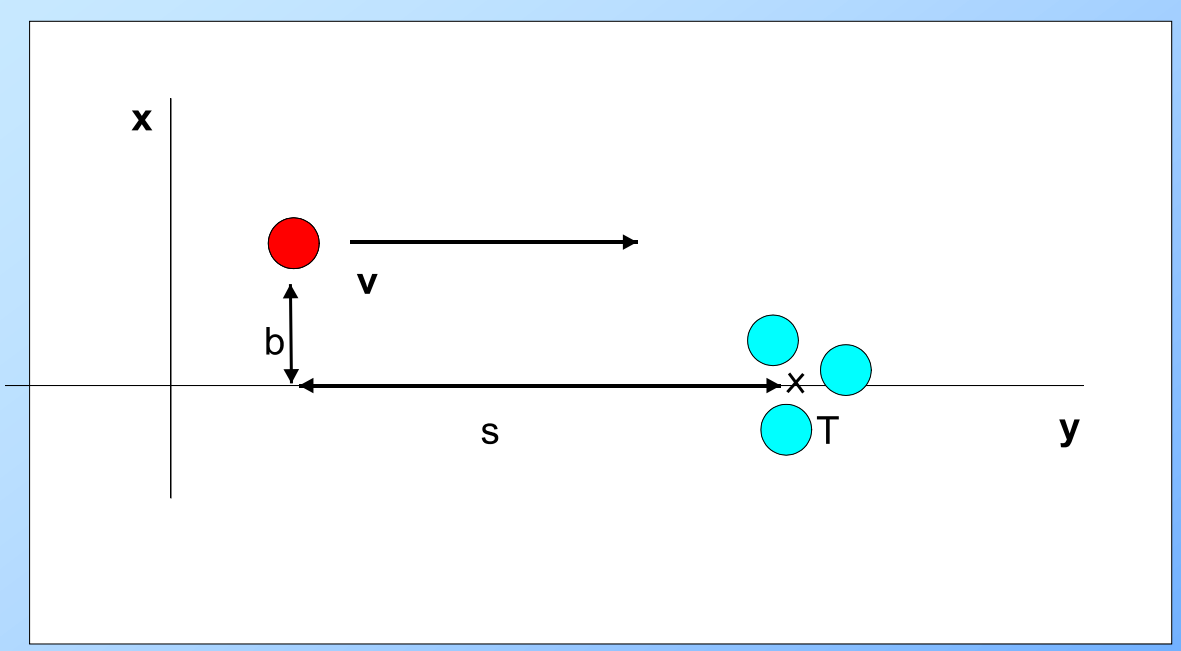
Jan Premus

Mendelovo gymnázium v Opavě

Pracoviště: Vysoká škola báňská

Vedoucí stáže: Ivan Janeček

Řešený problém



Kanály reakce:

$$Rg_3 + Rg^+ \rightarrow Rg_3^+ + Rg$$

$$Rg_3 + Rg^+ \rightarrow Rg_2^+ + (Rg_2 \vee 2Rg)$$

$$Rg_3 + Rg^+ \rightarrow Rg^+ + (Rg_3 \vee Rg_2 + Rg \vee 3Rg)$$

Řešený problém

- Energie střely zadána v laboratorní soustavě (terč v klidu)

- E_k = 0.02 – 1eV
- s = 50 Å
- b = 0 – 50 Å

- Terči dodána energie nulových kmitů

- Adiabatická ionizace střely
  - Konkrétní energetická hladina
  - Spin-orbitální rozštěpení – 2 stavy
    - dolní stav (6. a 7. energetická hladina)
    - horní stav (11. energetická hladina)

Účinný srážkový průřez

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

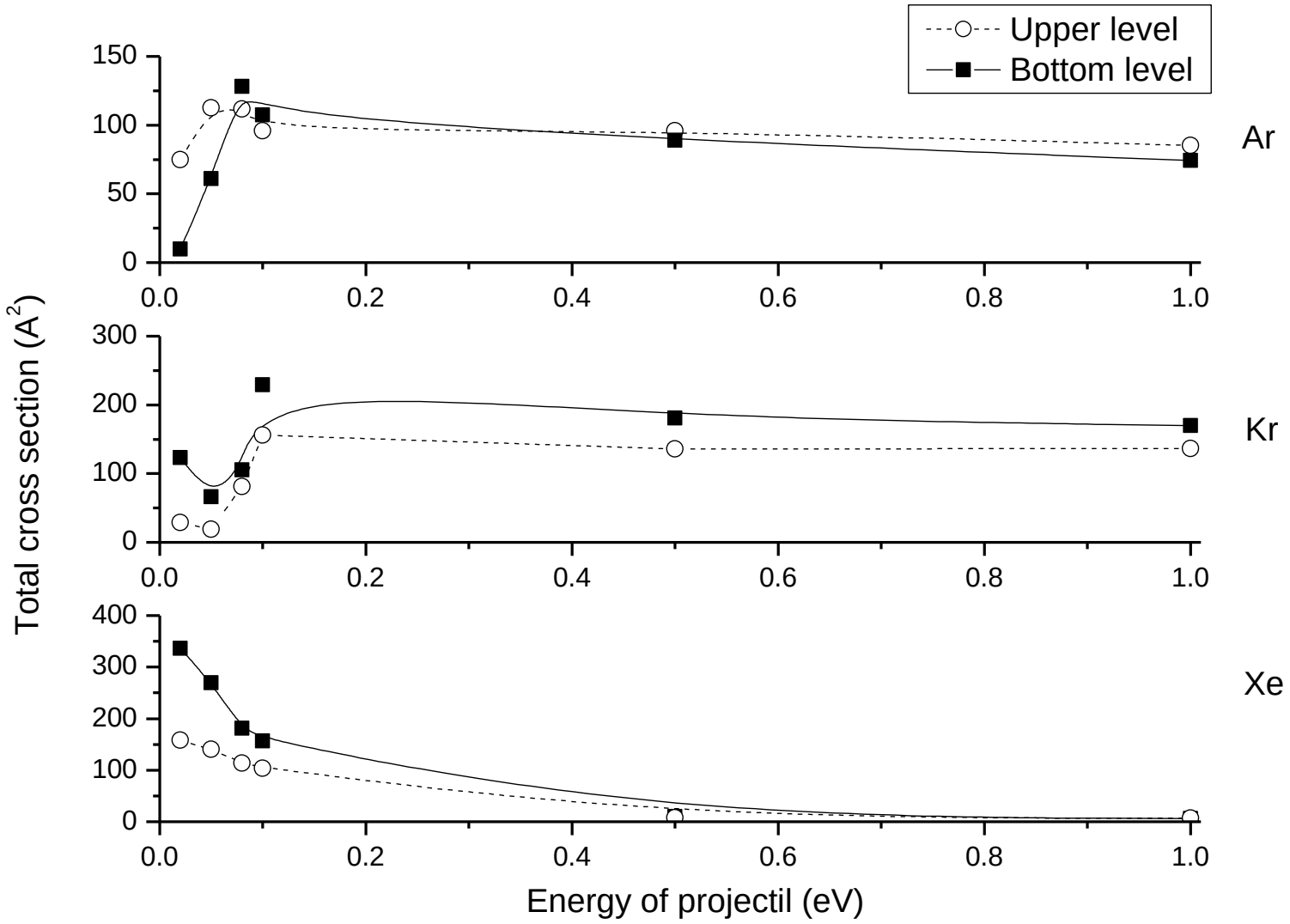
$$S_i = \pi \left[\left(\frac{b_{i+1} + b_i}{2} \right)^2 - \left(\frac{b_i + b_{i-1}}{2} \right)^2 \right]$$

Výpočet dynamiky

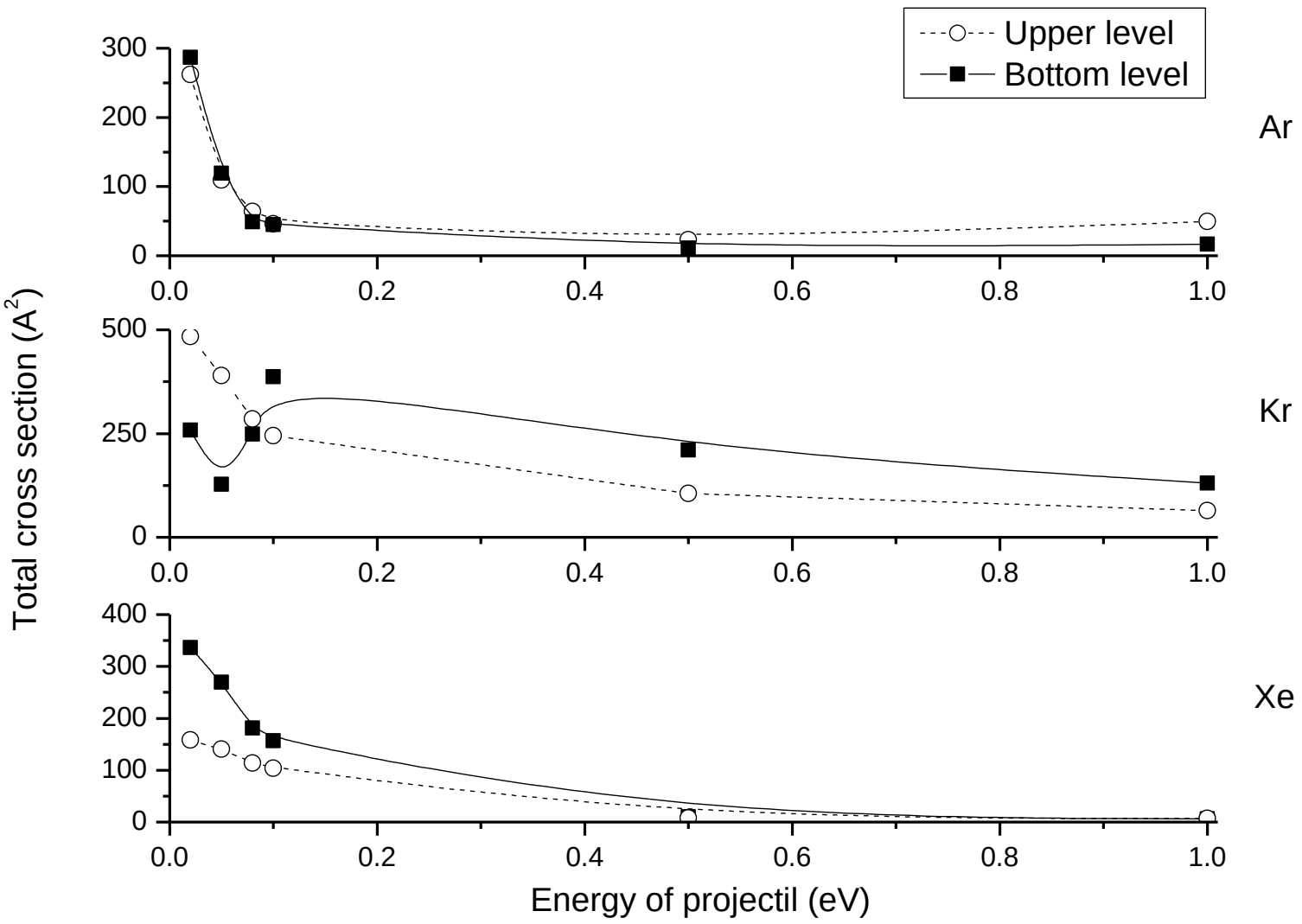
- **Hemikvantová dynamika** (HQD)
  - elektrony kvantově (**stav =** vlnové funkce – pravděpodobnosti výskytu)
  - těžká jádra klasicky (**stav** = polohy a hybnosti)

- **Metoda Meanfield s quenchingem** (MFQ)
  - jádra se pohybují v silovém potenciálu určeném jako vážený průměr energií elektronových hladin
  - periodické pokusy o přeskok na konkrétní energetickou hladinu
  - odstranění částečných nábojů na fragmentech po rozpadu systému
  - ***MFQ – AMP/S*** – varianta MFQ, energie se dorovnává přeškálováním hybností jader, problém zachování nenulového momentu hybnosti, pravděpodobnosti přeskoků z amplitud
  - ***MFQ – AMP/SS*** – nová metoda, u srážkového experimentu zachovává individuální momenty hybnosti při přeskoku, tedy i celkový
  - ***MFQ – AMP/SR*** – obecnější metoda, zachování celkového momentu hybnosti přeškálováním v rotující souřadnicové soustavě
  - **MFQ – C/SR** – stejně jako u AMP/SR, pravděpodobnosti přeskoků se ale počítají z kinetických couplingů

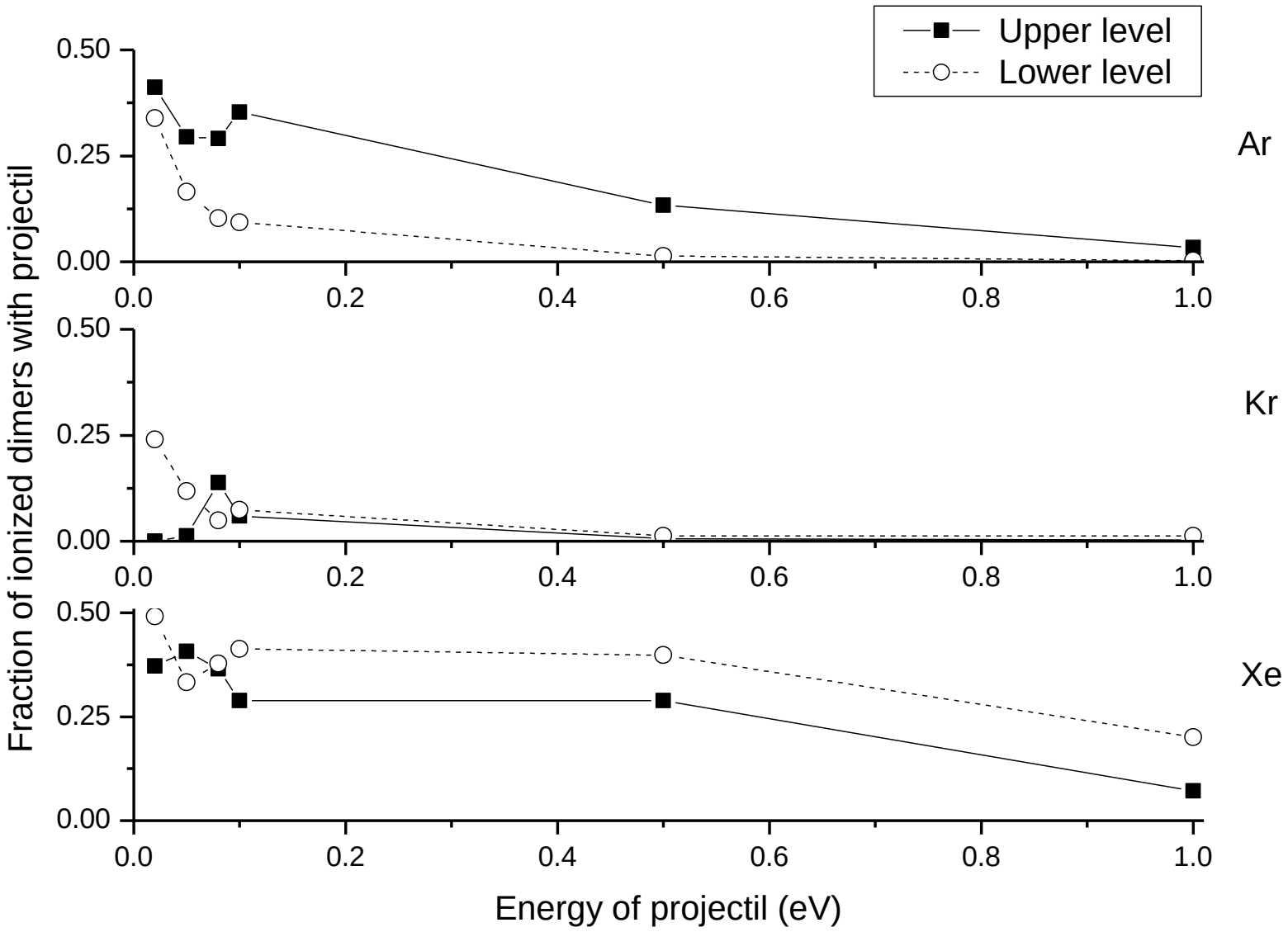
Produkce nabitých monomerů – účinný srážkový průřez



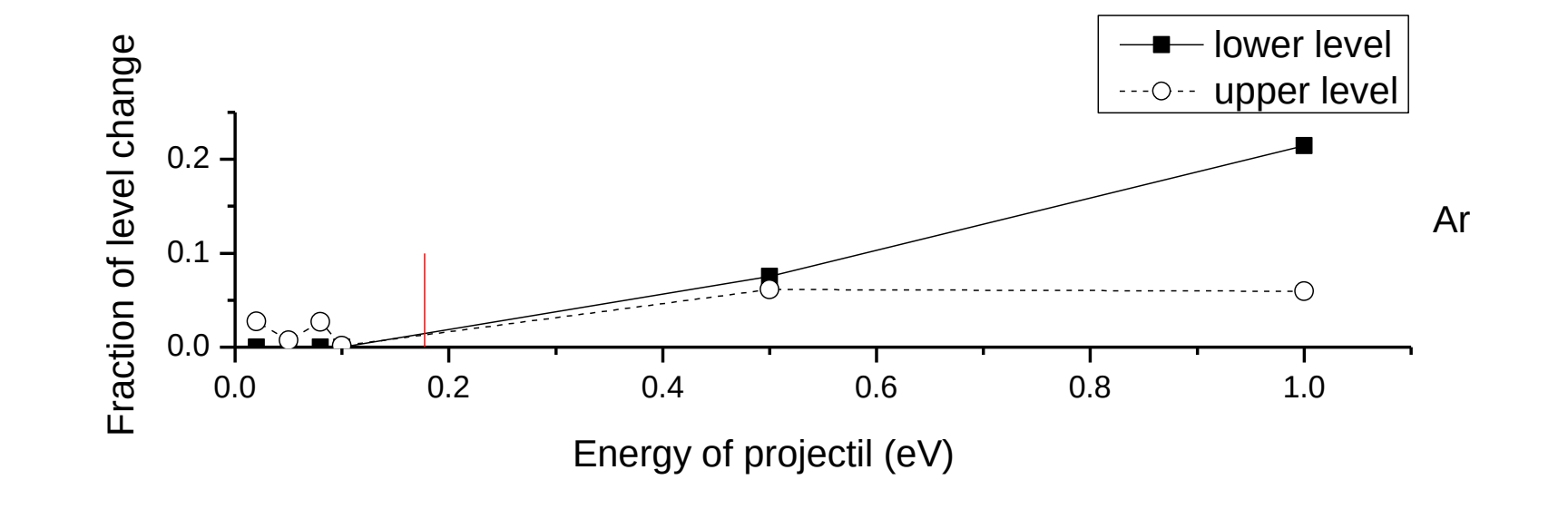
Produkce nabitých dimerů – účinný srážkový průřez



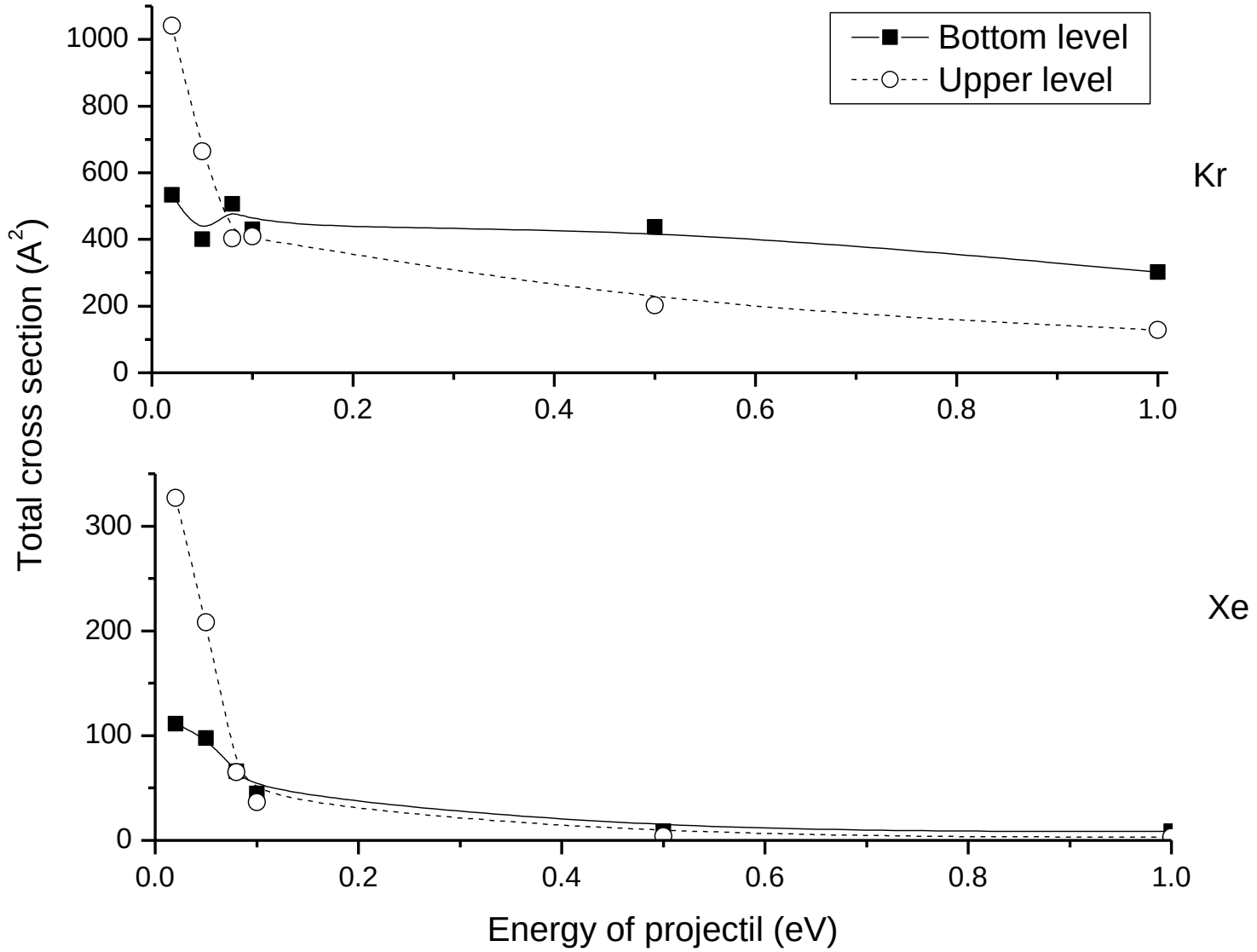
Zachycení střely do nabitého dimeru



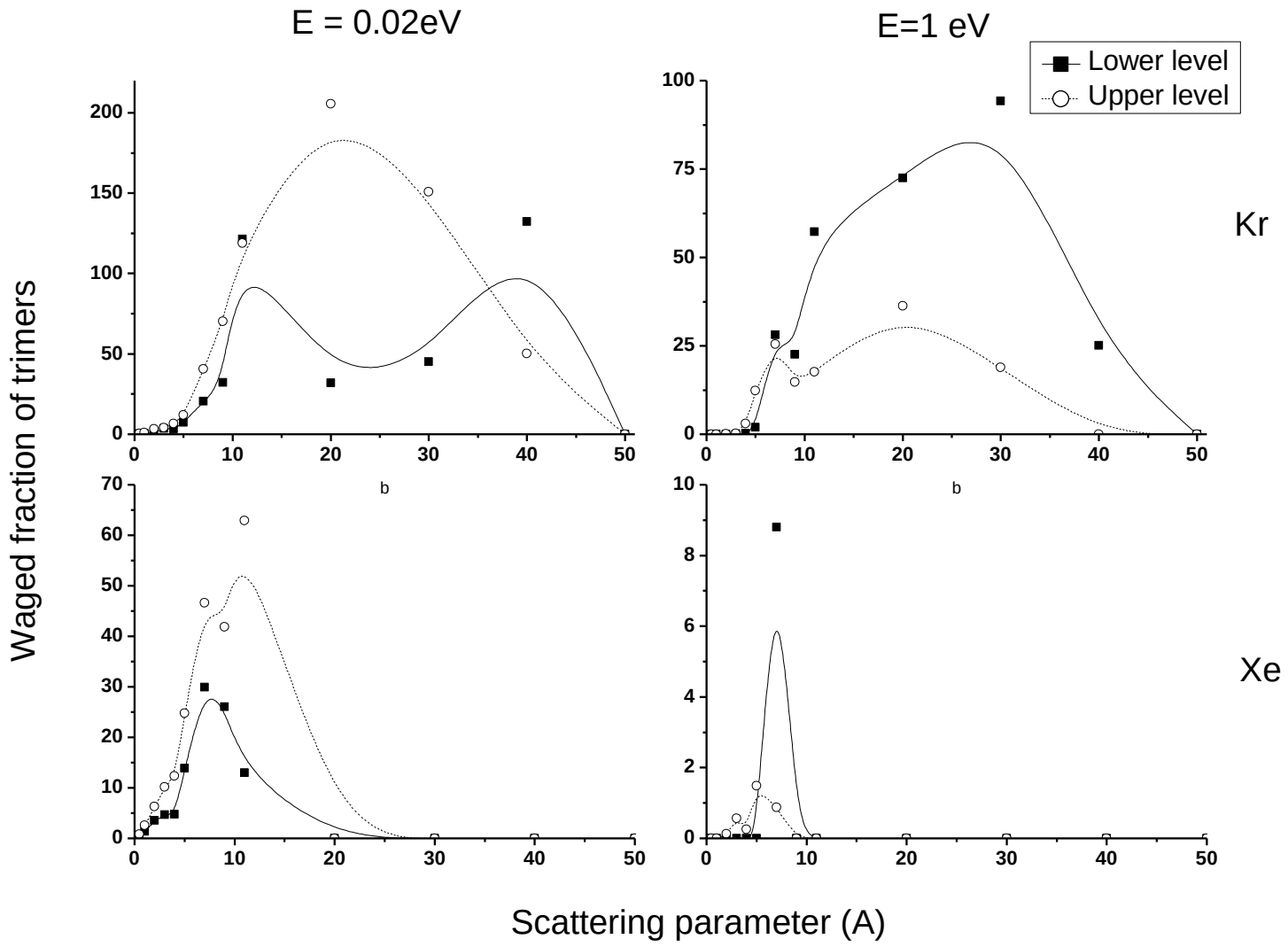
Nabité dimery v opačném energetickém stavu



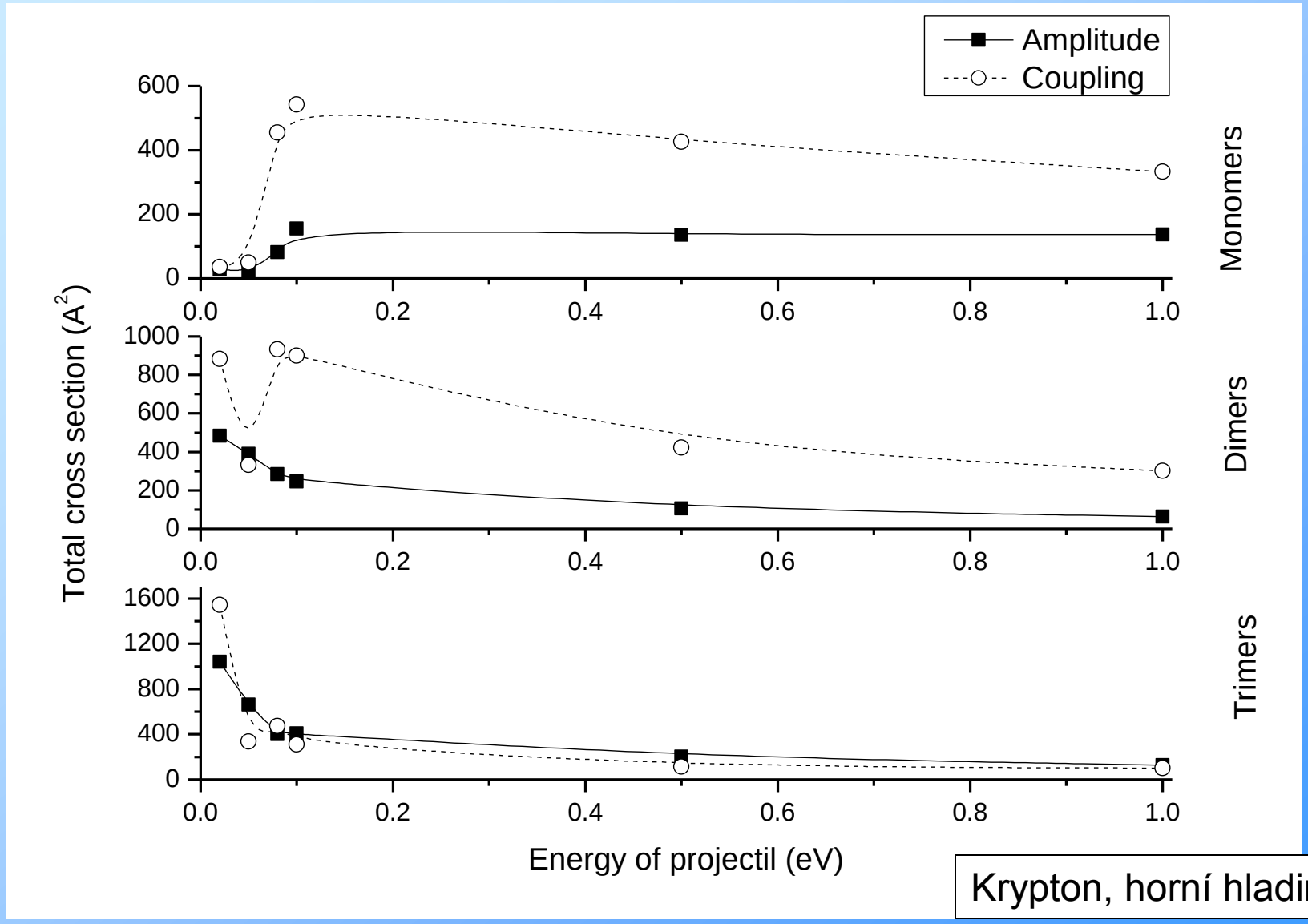
Produkce nabitých trimerů – účinný srážkový průřez



Vážené zastoupení nabitých trimerů



Srovnání metod AMP a C



Krypton, horní hladina

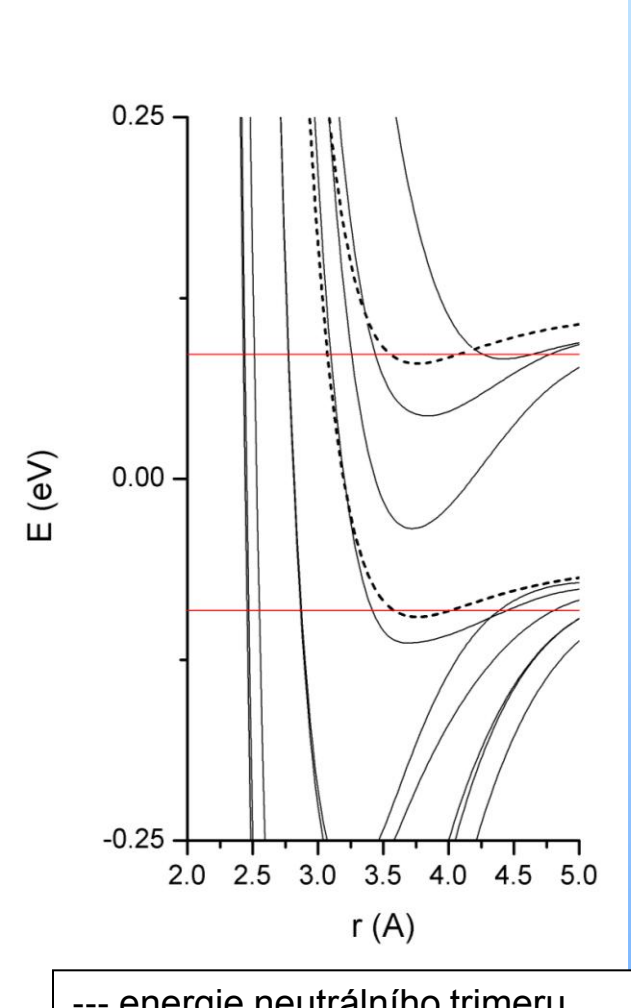
Přeskok náboje ze střely na terč

- Krypton, horní hladina
- E_k = 0.5 eV, b = 25 A
- Tabulka – průběh výměny náboje po 41.200 ps
- $S_{střela - terč}$ = 41.6 A

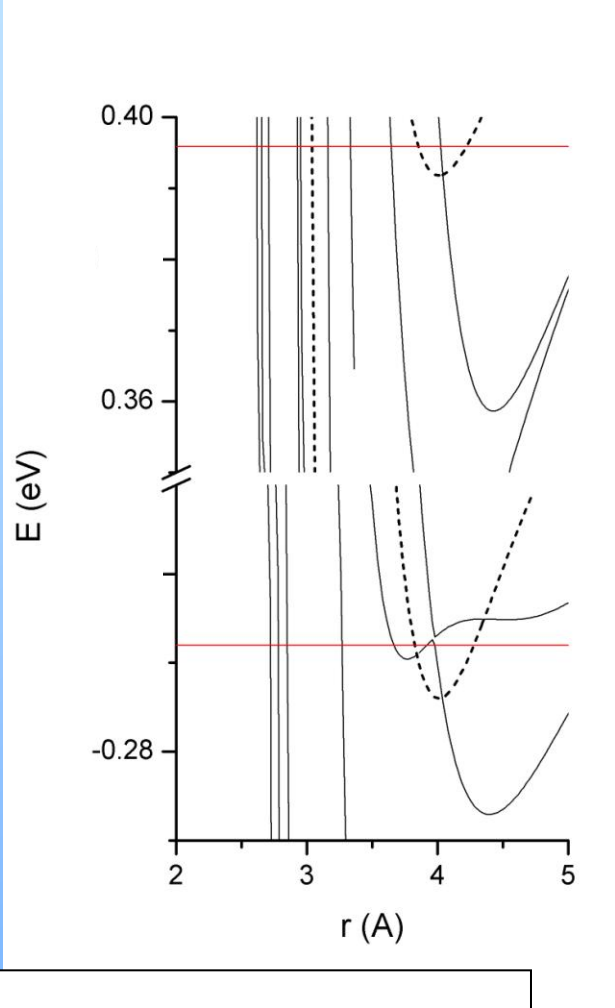
t (fs)	$q_{střela}$	$q_{terč}$
0.0 (quench)	1.0	0.0
3.0	0.7738	0.2262
6.0	0.7738	0.2262
9.0	0.7738	0.2262
10.0 (quench)	0.0	1.0

Energetické hladiny – Rg_3 + Rg

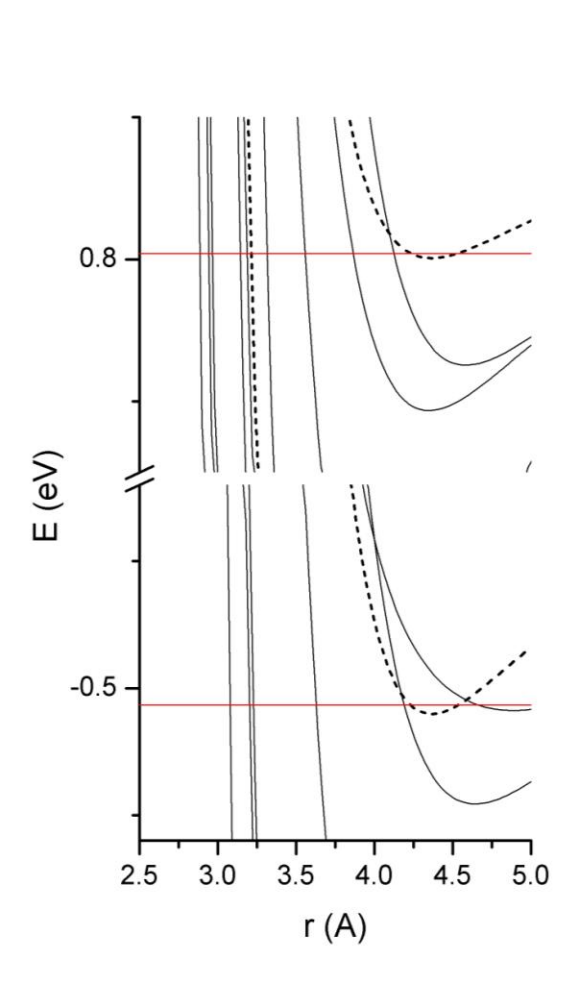
Argon



Krypton



Xenon



--- energie neutrálního trimeru
— energie nabitého trimeru
— energie stabilní konfigurace neutrálního trimeru + nulové kmity

Shrnutí

- Účinné srážkové průřezy pro tvorbu nabitých fragmentů při srážkách trimerů s iontem
- Odlišné chování Kryptonu
  - Menší zastoupení dimerů vzniklých záchytem střely
  - Velké množství nabitých trimerů – vznikají až pro b = 40 A
  - Pravděpodobně kvůli vzdáleným přeskokům náboje
- Přechod na opačnou energetickou hladinu
  - Pouze u argonu
  - Pro přechod na horní je nutno dodat dostatek energie