# Fragmentační kanály ionizovaných klastrů vzácných plynů prostřednictvím energetické analýzy a modelu DIM

Bc. Pavel Naar

Doc. Ing. Ivan Janeček, CSc.

# Obsah

- Úvod
- Studovaný proces
- Použité metody
- Výsledky pro
  - Pentamery
  - Hexamery
  - Heptamery
  - Oktamery
  - Nonamery
- Závěr

# 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)
    - Trojčásticová disperzní interakce (N3)
- Vibrační energii byla nastavena na disociační limitu (energie odpovídající vypaření jednoho atomu z klastru)
- Při simulacích jsme využili tří programových balíků, vytvořených na Ostravské Univerzitě v rámci Skupiny fyziky klastrů, longen, Multidis a Mdiesreader

# Studovaný proces

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

# Použité metody

- Monte Carlo
- Molekulární dynamika
- Bornova-Oppenheimerova aproximace
- Diatomics in molecules

# Použité metody

**Monte Carlo**

- Využívá pseudonáhodných čísel
- V našem případě ho využíváme jako generátor konfigurací neutrálních klastrů
- Tyto konfigurace klastry jsou
  - Pokřivené
  - Vibračně excitované

# Použité metody

**<u>Molekulární dynamika</u>**

- Řeší pohybové rovnice numerickým způsobem
- Získáme trajektorie částic
- Čím více interakcí započítáváme tím více je popis trajektorie částice složitější

# Použité metody

## Bornova-Oppenheimerova aproximace

- Separace pohybových rovnic jader a elektronů
  - Jádra elektrony
    - Velká hmotnost malá hmotnost
    - Malá rychlost velká rychlost

$$\left[-\sum_{J=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2M_J}\Delta_J-\sum_{j=1}^{n}\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_j+V\left(\vec{R}_J,\vec{r}\right)\right]\psi\left(\vec{R}_J,\vec{r}\right)=E\psi\left(\vec{R}_J,\vec{r}_j\right),$$

- Stacionární Schrödingerova rovnice pro N jader a n elektronů

# Použité metody

## 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

# Pentamery

| Monomery Argonu | | | | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | Energetická analýza | Molekulární dynamika po 10ps | Multiscale model | | | | | | | | | Experiment |
| | | | 1µs | | | 10µs | | | ∞s | | | |
| | | | Comb | Rad | Non-rad | Comb | Rad | Non-rad | Comb | Rad | Non-rad | |
| L11 | 96,6% | 0% | 96,4% | 0,1% | 96,4% | 96,4% | 0,1% | 96,4% | 96,4% | 0,1% | 96,4% | 29% |
| L12 | 100% | 0% | 100% | 0,6% | 100% | 100% | 2% | 100% | 100% | 3,1% | 100% | |
| L13 | 100% | 0,2% | 99,8% | 0,5% | 99,8% | 99,8% | 2,8% | 99,8% | 99,8% | 5,9% | 99,8% | |
| L14 | 100% | 22,2% | 100% | 20,9% | 100% | 100% | 23,3% | 100% | 100% | 29,7% | 100% | |
| L15 | 100% | 56,6% | 99,6% | 63,6% | 99,6% | 100% | 63,9% | 100% | 100% | 68,3% | 100% | |

# Pentamery

| Monomery Kryptonu | | | | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | Energetická analýza | Molekulární dynamika po 10ps | Multiscale model | | | | | | | | | Experiment |
| | | | 1µs | | | 10µs | | | ∞s | | | |
| | | | Comb | Rad | Non-rad | Comb | Rad | Non-rad | Comb | Rad | Non-rad | |
| L11 | 100% | 0% | 99,4% | 4,4% | 99,4% | 99,4% | 9,4% | 99,4% | 99,4% | 9,5% | 99,4% | 96,5% |
| L12 | 100% | 0% | 99,6% | 13,9% | 99,8% | 99,6% | 38,5% | 99,8% | 99,6% | 40,1% | 99,8% | |
| L13 | 100% | 0% | 99,9% | 9,9% | 100% | 99,9% | 34,1% | 100% | 99,9% | 37,6% | 100% | |
| L14 | 100% | 0% | 99,5% | 1,2% | 99,9% | 99,6% | 4,3% | 100% | 99,6% | 5,4% | 100% | |
| L15 | 100% | 2,4% | 99,7% | 3,3% | 100% | 99,8% | 7,6% | 100% | 99,8% | 10,6% | 100% | |

# Pentamery

| Monomery Xenonu | | | | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | Energetická analýza | Molekulární dynamika po 10ps | Multiscale model | | | | | | | | | Experiment |
| | | | 1µs | | | 10µs | | | ∞s | | | |
| | | | Comb | Rad | Non-rad | Comb | Rad | Non-rad | Comb | Rad | Non-rad | |
| L11 | 100% | 0% | 97,6% | 27,6% | 98,5% | 97,8% | 33,5% | 98,8% | 97,8% | 33,5 % | 99% | 97,5 |
| L12 | 100% | 0% | 98,7% | 25,3% | 99,7% | 98,8% | 41,1% | 100% | 98,8% | 41,1 % | 100 % | |
| L13 | 100% | 0% | 98% | 19,8% | 99% | 98,3% | 36,7% | 99,6% | 98,3% | 37% | 99,6 % | |
| L14 | 100% | 0% | 95,6% | 1,2% | 98,9% | 95,8% | 2,3% | 99,4% | 95,8% | 2,4% | 99,6 % | |
| L15 | 100% | 0% | 95,6% | 1,1% | 98,7% | 95,7% | 2% | 99,2% | 95,7% | 2,1% | 99,2 % | |

# Hexamery

| Monomery Argonu | | Monomery Kryptonu | |
|---|---|---|---|
| | Energetická analýza | | Energetická analýza |
| L13 | 12,8% | L13 | 100% |
| L14 | 100% | L14 | 100% |
| L15 | 100% | L15 | 100% |
| L16 | 100% | L16 | 100% |
| L17 | 100% | L17 | 100% |
| L18 | 100% | L18 | 100% |
| Experiment | 42% | Experiment | 92,6% |

# Heptamery

| Monomery Argonu | | Monomery Kryptonu | |
|---|---|---|---|
| | Energetická analýza | | Energetická analýza |
| L15 | 0,2% | L16 | 100% |
| L16 | 100% | L16 | 100% |
| L17 | 100% | L17 | 100% |
| L18 | 100% | L18 | 100% |
| L19 | 100% | L19 | 100% |
| L20 | 100% | L20 | 100% |
| L21 | 100% | L21 | 100% |
| Experiment | 22% | Experiment | 90,2% |

# Oktamery

| Monomery Argonu | |
|---|---|
| | Energetická analýza |
| L17 | 0% |
| L18 | 88,6% |
| L19 | 100% |
| L20 | 100% |
| L21 | 100% |
| L22 | 100% |
| L23 | 100% |
| L24 | 100% |
| Experiment | 22% |

# Nonamery

| Monomery Argonu | |
|---|---|
| | Energetická analýza |
| L19 | 0% |
| L20 | 7,2% |
| L21 | 90% |
| L22 | 100% |
| L23 | 100% |
| L24 | 100% |
| L25 | 100% |
| L26 | 100% |
| L27 | 100% |
| L28 | 100% |
| Experiment | 34% |

# Závěry

- Z energetických analýz vyplívá, že klastry mají dostatek energie na produkci nabitých monomerů
- U pentamerů byl použit multiscale model na nezkonvergovaná data a výsledky tímto modelem získané nejsou přesné

Děkuji za pozornost