

# ROZPAD KLASTRŮ VZÁCNÝCH PLYNŮ PO SRÁŽKÁCH S IONTY - STUDIUM POMOCÍ PARALELIZOVANÝCH SIMULAČNÍCH MODELŮ - ANALÝZA NA ZÁKLADĚ DALITZOVÝCH DIAGRAMŮ

**Lukáš Pala**

Mendelovo gymnázium Opava, Komenského 5, 746 01 Opava, lukypala@email.cz

## Abstrakt

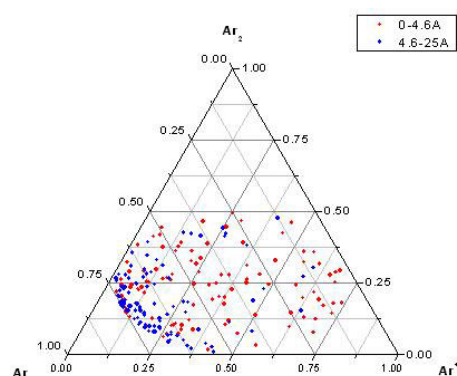
Tento příspěvek pojednává o mé práci zaměřené na studium srážek iontu s klastrem pomocí počítačové simulace. Jedná se o výsledky mé středoškolské stáže v rámci projektu Otevřená Věda IV. Ve své podstatě je volným pokračováním na práci započatou mým předchůdcem Janem Premusem, který podobné výsledky již prezentoval. Budu podávat informaci o nových výsledcích, které byly získány modifikovanými metodami. Další zajímavé informace byly získány také prostřednictvím *Dalitzových diagramů*.

Klastrem rozumíme shluk atomů, v němž jsou atomy velmi slabě vázány a k jejich odtržení od sebe stačí poměrně slabé síly. Počet atomů může být různý, od několika jednotek až po stovky i tisíce. Klastre obvykle vykazuje specifické vlastnosti oproti makroskopické látce obsahující mnohonásobně větší počty atomů. V našem výzkumu se zabýváme malými klastry atomů vzácných plynů, konkrétně argonu, kryptonu a xenonu. Každý plyn má jiné vlastnosti, jeho atomy se přitahují jinými silami a tomu je potřeba přizpůsobit i metodu pro výpočet vývoje systému v čase.

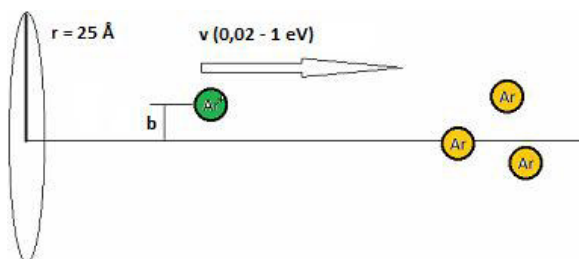
Základem našich programů je paralelizovaný balík *Multidis*, jenž pomocí *hemikvantové dynamiky* provádí výpočet na základě interakčního modelu *diatomic in molecules* [1,2]. V průběhu studia jsem testoval různé pracovní varianty hemikvantové dynamiky.

Před simulací je třeba vytvořit vstupní podmínky, ve kterých je náhodně zrotovaný klastre daného plynu. Přidáme střelu, kterou představuje ionizovaný atom se zadanou rychlostí. To vše je odesláno na superpočítač, na kterém probíhá velké množství paralelních výpočtů jednotlivých srážek. Celý soubor je pak následně analyzován.

Z výsledných dat lze určit různé fyzikální parametry (např. účinný srážkový průřez, energie, rychlosti, atd.) a analyzovat způsob rozpadu klastre a stav výsledných fragmentů. Na počátku mé stáže jsem se zaměřil na analýzu rozdělení kinetické energie mezi fragmenty, které vznikly po srážce. V případě typického rozpadu na tři kanály jsem příslušná energie zpracoval do ternárního diagramu označovaného jako *Dalitzův diagram* (**Obrázek 1**).



**Obrázek 1.** Dalitzův diagram



**Obrázek 2.** Schéma pseudoexperimentu

Dalším výstupem mé práce jsou histogramy zastoupení všech typů vzniklých nabitých fragmentů tj. monomerů, dimerů, trimerů a tetramerů v závislosti na *srážkovém parametru - b* (**Obrázek 2**), přičemž jsem studoval zda vznikly výměnou náboje nebo zachycením nalétávajícího iontu.

Ze studií plynou některé zajímavé dílčí závěry. Na základě dat zobrazených v Dalitzových diagramech bylo možné určit, že v případě rozpadu klastre argonu na neutrální dimer, neutrální a nabitý monomer si většinu hybnosti odnese nenabitý monomer. Pokud vzniká nabitý dimer, je hybnost rovnoměrně rozložena mezi oba neutrální monomery. Dle očekávání s rostoucí energií střely klesá zastoupení nabitých dimerů a trimerů produkovaných po srážce.

## Literatura

[1.] JANEČEK I., HRIVŇÁK D., KALUS R., GADÉA F. X. *Theoretical modeling of postionization fragmentation of rare-gas trimer cations* Journal of chemical physics, 2006, issue 10, vol. 125, Art. No. 104315.

[2.] JANEČEK I., CINTAVÁ S., HRIVŇÁK D., KALUS R., FÁRNÍK M., GADÉA F. X. *Postionization fragmentation of rare-gas trimers revisited with new theoretical approaches* Journal of chemical physics, 2009, issue 11, vol. 131, Art. No. 114306.