

# Úhlové závislosti v disociativním záchytu elektronů na molekulách

Michal Tarana

Oddělení teoretické chemie

Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského, AVČR, Praha, ČR



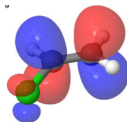
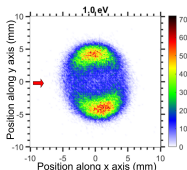
# Studium disociativního záchytu

## ▶ Cíle:

- ▶ Data pro astrofyziku, biochemii (účinné průřezy...).
- ▶ Pochopení mechanismu (pohyb jader při disociaci).

## ▶ Metody:

- ▶ Tradičně: Měření účinných průřezů (kolik fragmentů vznikne při daném proudu molekul a elektronů).
  - ▶ Pokročilá teorie
- ▶ Nově: Měření úhlového rozdělení fragmentů
  - ▶ Teorie ve vývoji.



# Úhlové rozdělení fragmentů disociativního záchytu

- ▶ Teoretické výpočty úhlového rozdělení fragmentů.
- ▶ Objasnění mechanismů disociace ze znalosti úhlové distribuce.
  
- ▶ Aktivity:
  - ▶ Odvozování rovnic kvantové teorie rozptylu.
  - ▶ Programování numerických výpočtů.
  - ▶ Práce s programy pro kvantovou chemii a molekulární strukturu.
  
- ▶ Kam pak:
  - ▶ Teoretická atomová a molekulová fyzika (různé směry - elektron v kontinuu).