

Úvod

Při srážce volného elektronu s dvouatomovou molekulou může dojít k rezonančnímu zachycení elektronu a přechodnému vzniku aniontu této molekuly. Ten pak následně může zanikat různými cestami, například se může elektron znovu odtrhnout, přičemž zanechá molekulu v excitovaném stavu, případně může dojít k zachycení elektronu jedním z atomů a disociaci molekuly, nazývaný disociační záchyt. Lze studovat i opačný proces, asociativní odtržení, kdy kombinací dvou atomů, z nichž některý nese záporný náboj, vznikne neutrální molekula a volný elektron.

K popisu zmíněných jevů je třeba znát potenciálové křivky neutrální molekuly i aniontu. Pro neutrální molekulu lze použít křivky získat kvantově chemickými výpočty. Pro anion lze kvantově chemické výpočty na určitém úseku potenciálové křivky použít, jen pokud energie křivky v dané oblasti je nižší než energie základního stavu neutrální molekuly. V opačném případě není nadbytečný elektron vázaný, ale přejde v rezonanci, což vede k selhání kvantově chemických metod.

V takových oblastech je třeba získat výsledky, které pak použijeme v jaderné dynamice, pomocí kvantové teorie rozptylu s použitím aproximace pevných jader. Jedna z metod vhodných pro tento účel je výpočet pomocí R-matic, což je metoda původně vyvinutá pro použití v jaderné fyzice, ale ukázala se být užitečná i v rozptylu na atomech a molekulách. Ta rozděluje prostor, na němž probíhá výpočet na dvě oblasti, vnitřní, kde se řeší celý problém s okrajovými podmínkami, a vnější, kde se uvažuje jen vlnová funkce volného elektronu, a v této oblasti se hledají taková řešení, která na rozhraní s vnitřní oblastí navazují. V R-maticových výpočtech se používá báze popisující kontinuum, která se ve vnitřní oblasti rozšíří o vlnové funkce popisující stavy neutrální molekuly.

V R-maticových výpočtech se používají některé výsledky kvantové chemie. Pro výpočty je třeba najít metodu a bázi dobře popisující základní i excitované stavy neutrální molekuly, v R-maticové teorii i dále v této práci obvykle nazývané target. Tato metoda musí být provedena v relativně malé bázi a musí dávat dostatečně přesné výsledky pro geometrie na kterých provádíme rozptylový výpočet, v našem případě se jedná o okolí rovnovážné vzdálenosti základního stavu neutrální molekuly. Dále je nutné nalézt potenciálové křivky základního stavu neutrální molekuly i aniontu, které jsou dostatečně přesné, aby je bylo možné použít jako referenční data pro nalezení vhodného nastavení vstupních parametrů u R-maticových výpočtů.

Tato práce se bude zabývat hledáním a srovnáním různých popisů na dvou konkrétních molekulách, BeH a OH, pro následné provedení R-maticových výpočtů.