baratz | ODA

Intercambio de carga, disociacion y excitación vibracional en colisiones ión-molécula. Estudio teórico de colisiones ión-H2 [

Fernández Menchero, Luis

UAM Ediciones,
2005

Monografía

En la presente tesis doctoral se da un estudio teórico detallado de los efectos vibrónicos en colisiones ión-molécula, aplicándolo a dos sistemas particulares en estudio: H+ + H2, y N5+ + H2.Del sistema H+ + H2 se hace un desarrollo close-coupling vibrónico, introduciendo una base vibracional completa, con estados tanto ligados como del continuo de disociación. Este sistema se estudia dinámicamente en régimen cuántico, aplicando la aproximación rotacional IOSA, y en semiclásico, mediante el método iconal.La riqueza del tratamiento hace que se pueda cubrir un muy amplio rango de energías de impacto, entre 20 eV/amu y 10 keV /amu.La mayor dificultad del sistema H+ + H2 es la presencia de una intersección cónica entre las dos primeras superficies de energía potencial. Para su tratamiento se ha desarrollado un método de regularización.En el caso de la colisión N5+ + H2 se introducen una gran cantidad de estados electrónicos en la base, ya que tanto los procesos de captura sencilla (SEC) como de doble captura autoionizante (ADC) son relevantes, lo que hace inviable un tratamiento vibrónico completo, luego este sistema es tratado en términos de la aproximación súbita vibracional en el rango de energías de impacto en que ésta es aplicable, entre 0.1 y 10 keV/amu.Este sistema tiene por dificultades adicionales el presentar los estados de interés en la colisión por encima del límite de ionización, con lo que es preciso una técnica de bloque-diagonalización para poder ser obtenidas sus funciones de onda mediante un cálculo variacional. Además las superficies de energía potencial presentan sucesiones de cruces evitados estrechos, en los cuales se ha implementado una técnica de seguimiento de signos y diabatización.Por último se muestran los resultados de las secciones eficaces calculadas para cada reacción comparadas con los datos experimentales y cálculos previos presentes en la bibliografía. Gracias al tratamiento vibrónico se pueden dar por primera vez resultados de secciones eficaces disociativas y espectros de disociación

https://rebiunoda.pro.baratznet.cloud:28443/OpacDiscovery/public/catalog/detail/b2FpOmNlbGVicmF0aW9uOmVzLmJhcmF0ei5yZW4vMjk3MTY2Ng

Título: Intercambio de carga, disociacion y excitación vibracional en colisiones ión-molécula. Estudio teórico de colisiones ión-H2 Archivo de ordenador] Tesis doctoral presentada por Luis Fernández Menchero ; dirigida por el Dr. Luis Méndez Ambrosio

Editorial: Madrid UAM Ediciones 2005

Descripción física: 1 disco compacto (CD-Rom) 12 cm

Mención de serie: Tesis Doctorales / Universidad Autónoma de Madrid GU-18/2006

Nota general: Tesis Doctoral leída el 23 de septiembre de 2005, en la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma de Madrid

Tesis: Tesis publicada. Universidad Autónoma de Madrid, 2005

Detalles del sistema: Requisitos del sistema: Adobe Acrobat Reader

ISBN: 8474774977

Materia Entidad: Universidad Autónoma de Madrid (España)- Tesis y disertaciones académicas

Materia: Colisiones (Física nuclear)- Tesis y disertaciones académicas

Autores: Méndez Ambrosio, Luis, dir

Entidades: Universidad Autónoma de Madrid. Servicio de Publicaciones ed

---

Baratz Innovación Documental

- Gran Vía, 59 28013 Madrid
- (+34) 91 456 03 60
- informa@baratz.es