

Název práce: Excitace molekul studenými elektrony

Autor: Miroslav Šulc

Katedra / Ústav: Ústav teoretické fyziky, Univerzita Karlova v Praze

Vedoucí disertační práce: prof. RNDr. Jiří Horáček, DrSc.,
Ústav teoretické fyziky, Univerzita Karlova v Praze

Abstrakt: Pozornost je věnována vybraným metodám pro popis nízkoenergetických elektron-molekulových srážek. První část práce se zabývá aplikací metody R-matice v kombinaci se Schwinger-Lanczos variačním principem pro potenciálový rozptyl v případě dalekodosaňových interakcí. Další sekce se zabývá aspekty konstrukce korelačně-polarizačního potenciálu v metodě Discrete Momentum Representation (DMR) s využitím prostředků aproximace lokální hustoty v kontextu teorie funkcionálu hustoty (DFT). Získané poznatky jsou následně aplikovány pro body-frame výpočty na úrovni aproximace statické výměny se zahrnutou polarizací (SEP) v rámci analýzy experimentálních dat pro e^-N_2 srážky představující součást širšího projektu věnovaného studiu rotačních excitací malých molekul v plynné fázi iniciovaných srážkami s elektrony. V případě N_2 bylo pozorováno potlačení dozadního průřezu pro energie pod 95 meV zdůvodnitelné z teoretického hlediska destruktivní interferencí parciálních vln s $l \leq 1$. Pro polární molekuly je naproti tomu výhodné zavést zobecněné fázové posuvy vzhledem k dipólové asymptotice, které jsou následně určeny fitováním experimentálních dat integrálního a dozadního účinného průřezu. Příslušná metoda je demonstrována na datech pro CH_3Cl a SO_2 .

Klíčová slova: R-matice, metoda DMR, nízkoenergetické elektron-molekulové srážky, dipólová interakce, Volterra propagátor