

Кулоновский разлет трехатомной молекулы под действием излучения рентгеновского лазера на свободных электронах

С. З. Пирчхадзе^{1*} А. Н. Грум-Гржимайло^{2†}

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра общей ядерной физики Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.

²НИИ ядерной физики имени Д. В. Скобельцына МГУ имени М. В. Ломоносова Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 5 (Статья поступила 26.02.2020; подписана в печать 16.03.2020)

Теоретически исследуется кулоновский разлет молекулы H_2O под действием импульса рентгеновского лазера на свободных электронах. В рамках классической механики рассмотрены следующие вопросы: описание движения кулоновских центров для случая мгновенной полной ионизации молекулы; феноменологический учет последовательной ионизации молекулы во время облучения; диаграммы Далица с учетом особенностей динамики кулоновского разлета.

PACS: 34.80.Nt, 33.80.-b УДК: 539.196.6

Ключевые слова: рентгеновское излучение, трехатомная молекула, диссоциация, ионизация, кулоновский взрыв, лазер на свободных электронах, вода.

ВВЕДЕНИЕ

Рентгеновские лазеры на свободных электронах (РЛСЭ) излучают короткие интенсивные импульсы в рентгеновском диапазоне. Под их воздействием происходит быстрая ионизация мишени, например, молекулы. Скорость этой ионизации может быть такова, что в течение нескольких фемтосекунд происходит полная ионизация молекулы, при которой ядра атомов, из которых состоит молекула, остаются практически неподвижными. Недавно полная ионизация была зарегистрирована для молекулы воды H_2O , облученной в эксперименте на Европейском РЛСЭ [1]. При этом наблюдались на совпадения все три продукта диссоциации воды: два протона и ядро кислорода. Таким образом, в молекуле осуществляется так называемый "кулоновский взрыв". При кулоновском взрыве H_2O разлетаются три положительно заряженные частицы. В начальной конфигурации атомы водорода присоединены к атому кислорода, образуя угол 104.45° между связями (рис. 1). Вследствие этого могут наблюдаться эффекты, отсутствующие при линейном расположении ядер атомов (например, в молекуле углекислого газа CO_2). Задачу разлета трех кулоновских центров в нашем случае можно, в хорошем приближении, решать методами классической нерелятивистской динамики. Насколько нам известно, такая классическая задача трех тел с зарядами одного знака до сих пор не привлекала к себе внимания не только в связи с тем, что она не имела практических приложений, но и казалась тривиальной. Однако сейчас появилась практическая необходимость в анализе поведения таких трех (и более) частиц.

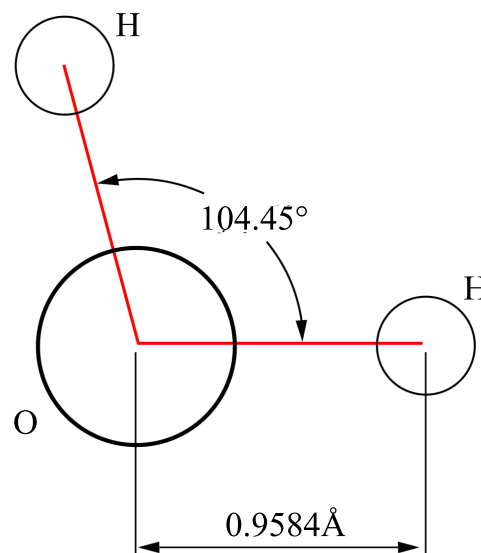


Рис. 1: Схематическое изображение молекулы воды H_2O

1. ЗАДАЧА ТРЕХ ОТТАЛКИВАЮЩИХСЯ КУЛОНОВСКИХ ЦЕНТРОВ

Задачу разлета трех массивных кулоновских центров будем решать в рамках классической нерелятивистской механики, используя в качестве примера молекулу H_2O .

Кулоновское взаимодействие между тремя частицами запишем в виде

$$U(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{Z_0 Z_1}{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_1|} + \frac{Z_0 Z_2}{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_2|} + \frac{Z_1 Z_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (1)$$

*E-mail: pirchkhadze.sz16@physics.msu.ru

†E-mail: grum@sinp.msu.ru

Уравнения движения трех частиц с взаимодействием (1) имеют вид:

$$\begin{aligned} m_0 \frac{d^2 \mathbf{r}_0}{dt^2} &= -\nabla_0 U(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \\ m_1 \frac{d^2 \mathbf{r}_1}{dt^2} &= -\nabla_1 U(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \\ m_2 \frac{d^2 \mathbf{r}_2}{dt^2} &= -\nabla_2 U(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \end{aligned}$$

где $\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ — расстояния от центра масс до ядра кислорода и двух протонов соответственно; Z_0, Z_1, Z_2 и m_0, m_1, m_2 — заряды и массы соответствующих частиц, которые мы записали в общем виде.

В этой работе мы пренебрегаем магнитной силой Лоренца, появляющейся при взаимодействии движущихся зарядов, спин-орбитальным взаимодействием собственного магнитного момента протона, движущегося в поле двух других зарядов, и взаимодействием спин-спин между протонами. Проведенные оценки показали, что вкладом этих взаимодействий можно пренебречь.

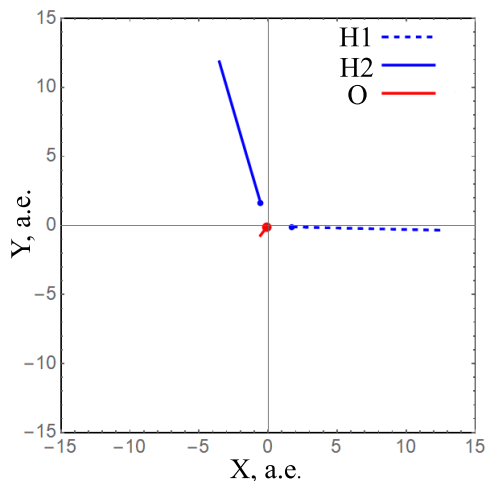


Рис. 2: Траектории разлета протонов H1 и H2 и ядра кислорода O в результате кулоновского взрыва молекулы H₂O ($Z_0 = 8, Z_1 = 1, Z_2 = 1$). Начало координат расположено в центре масс. Разлет промоделирован на временном интервале 5 фемтосекунд

Полученная система дифференциальных уравнений движения решалась с использованием программного пакета Wolfram Mathematica. Для молекулы H₂O траектории первоначально покоящихся частиц при разлете практически прямолинейны (рис. 2).

2. ДИАГРАММЫ ДАЛИЦА

При распаде одной частицы на три новых выполняются следующие законы сохранения [2]:

$$\begin{cases} T_0 + T_1 + T_2 = Q, \\ \mathbf{P}_0 + \mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2 = 0 \end{cases} \quad (2)$$

где Q — энергия распада (в случае распада H₂O — это потенциальная энергия трех отталкивающихся покоящихся зарядов), T_0, T_1, T_2 — кинетические энергии соответствующих частиц после распада, а $\mathbf{P}_0, \mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2$ — их импульсы.

Для реакции распада диаграмму Далица в плоскости можно определить как область, в которой выполняются законы сохранения энергии-импульса [3]. Для молекулы воды H₂O мы принимаем положение ядер до кулоновского взрыва фиксированным. Поведение частиц полностью детерминировано классическими уравнениями движения. Для иллюстрации динамики разлета мы выбираем диаграммы Далица, на которых отражаются абсолютные величины импульсов частиц после взрыва. За высоту равностороннего треугольника (рис. 3) берется единица, а расстояние от любой точки внутри треугольника до сторон определяется формулой

$$\left(\sum_{i=0}^2 |\mathbf{P}_i|^2 \right)^{-1} |\mathbf{P}_k|^2, \quad \text{где } k = 0, 1, 2.$$

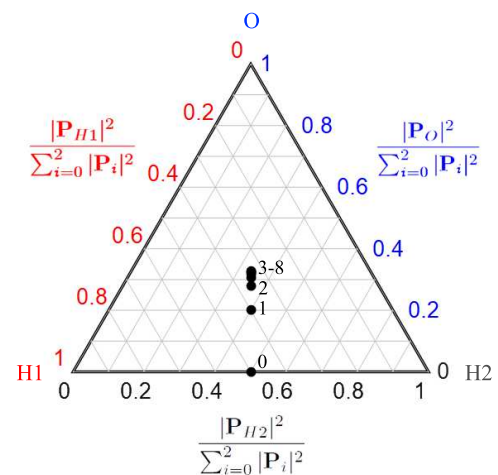


Рис. 3: Диаграмма Далица для кулоновского взрыва молекулы H₂O для различных зарядов вылетающего иона кислорода O^{q+} (цифрами показаны значения $q = 0, 1, \dots, 8$)

Диаграмма Далица в таком случае представляет собой точку, расстояния от которой до сторон показывают отношение квадрата импульса частицы к их сумме. До этого момента обсуждался случай, когда разлет происходит при фиксированных и максимальных зарядах разлетающихся частиц. Однако в действительности электроны покидают оболочку молекулы H₂O постепенно и следует рассматривать случаи зависящих от времени зарядов. Здесь мы сделаем только первый шаг в отклонении от модели мгновенной полной ионизации и рассмотрим частично ионизированный кислород при двух ядрах водорода. На диаграмме (рис. 3) отображены случаи с различными зарядами иона кислорода O^{q+}, где $q = 0, 1, \dots, 8$. Мы ожидаем в экспериментально измеренных диаграммах Далица ясный вертикальный след от событий с вылетом двух протонов

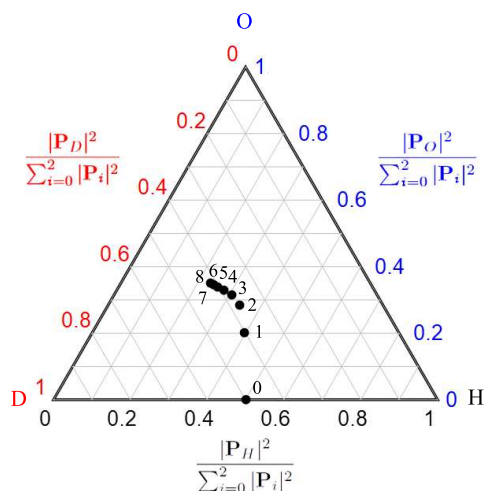


Рис. 4: Диаграмма Далица для кулоновского взрыва молекулы HDO для различных зарядов вылетающего иона кислорода O^{q+} (цифрами показаны значения $q = 0, 1, \dots, 8$)

и кислорода в состояниях с разной степенью ионизации.

Рассмотрим случай «полутяжелой» воды, где один

протон в атоме водорода заменен на дейтрон. Следует ожидать, что это нарушит симметрию диаграммы Далица на рис. 3 относительно вертикали. Кулоновский взрыв в таком случае отображается диаграммой Далица на рис. 4. Сравнение с рис. 3 показывает, что с увеличением заряда вылетающего иона кислорода все более заметно становится влияние разности масс вылетающего дейтрона и протона.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленная модель может быть развита во многих отношениях, например, введением распределения атомов в молекуле по начальным скоростям, зависимости эффективных зарядов от времени, переходом к более сложным группам симметрии и т.д. Сравнение с ожидаемыми экспериментальными данными, которые можно получить с использованием «реакционного микроскопа» COLTRIMS (COLd Target Recoil Ion Momentum Spectrometer) [4], должно показать, насколько адекватно простая классическая модель разлета трех заряженных фрагментов позволяет описать кулоновский взрыв реальных молекул.

[1] *Piancastelli M. N.*, private communication.

[2] *Копылов Г. И.* Основы кинематики резонансов. М.: Наука. 1970.

[3] *Строковский Е. А.* Лекции по основам кинематики элементарных процессов. М.: Университетская книга. 2010.

[4] *Ulrich J., editor* Ten Years of COLTRIMS and Reaction Microscopes. Max-Planck-Institute für Kernphysik. Heidelberg. 2004.

Coulomb explosion of a triatomic molecule by X-ray free electron laser

S. Z. Pirchkhadze^{1,a}, A. N. Grum-Grzhimailo^{2,b}

¹Department of General Nuclear Physics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University. Moscow 119991, Russia

²Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Lomonosov Moscow State University. Moscow 119191, Russia

E-mail: ^apirchkhadze.sz16@physics.msu.ru, ^bgrum@sinp.msu.ru

The Coulomb explosion of the H₂O molecule under the influence of a pulse of an X-ray free electron laser is studied theoretically. The following points are considered within the framework of the classical mechanics: a description of the motion of Coulomb centers for the case of instantaneous complete ionization of the molecule; phenomenological accounting of sequential ionization of the molecule during irradiation; Dalitz diagrams accounting for peculiar dynamical properties of the Coulomb explosion.

PACS: 34.80.Ht, 33.80-b

Keywords: X-rays, three-atomic molecule, dissociation, ionization, Coulomb explosion, free-electron laser, water

Received 26 February 2020.

Сведения об авторах

1. Пирчхадзе Семен Зурабович — студент; e-mail: pirchkhadze.sz16@physics.msu.ru.

2. Грум-Гржимайло Алексей Николаевич — доктор физ.-мат. наук, вед. науч. сотрудник; e-mail: grum@sinp.msu.ru.