

Вопрос 1: Траектория на Рис.3 выглядит очень естественно — от двухчастичного разлета при нуле до симметричного трехчастичного при полной ионизации. А влияет ли как-то на результаты угол, показанный на рис.1?

Угол в молекуле воды H_2O детерминирован и равен 104.45° . Этим молекула воды интереснее, например, молекулы CO_2 , у которой атомы кислорода находятся по обе стороны от атома углерода с углом 180° . Предполагалось, что при таком особом расположении атомов водорода в молекуле воды будет наблюдаться влияние спин-орбитального и спин-спиновых взаимодействий. Однако проведенные оценки показали, что этими взаимодействиями можно пренебречь. Учитывая только кулоновское взаимодействие, при изменении угла разворота без изменения расстояния между атомами водорода и кислородом, изменится только отношение импульса ядра кислорода к импульсам протонов. Картинка на диаграмме Далица при этом останется симметричной, как видно на рис.1b и рис.2b.

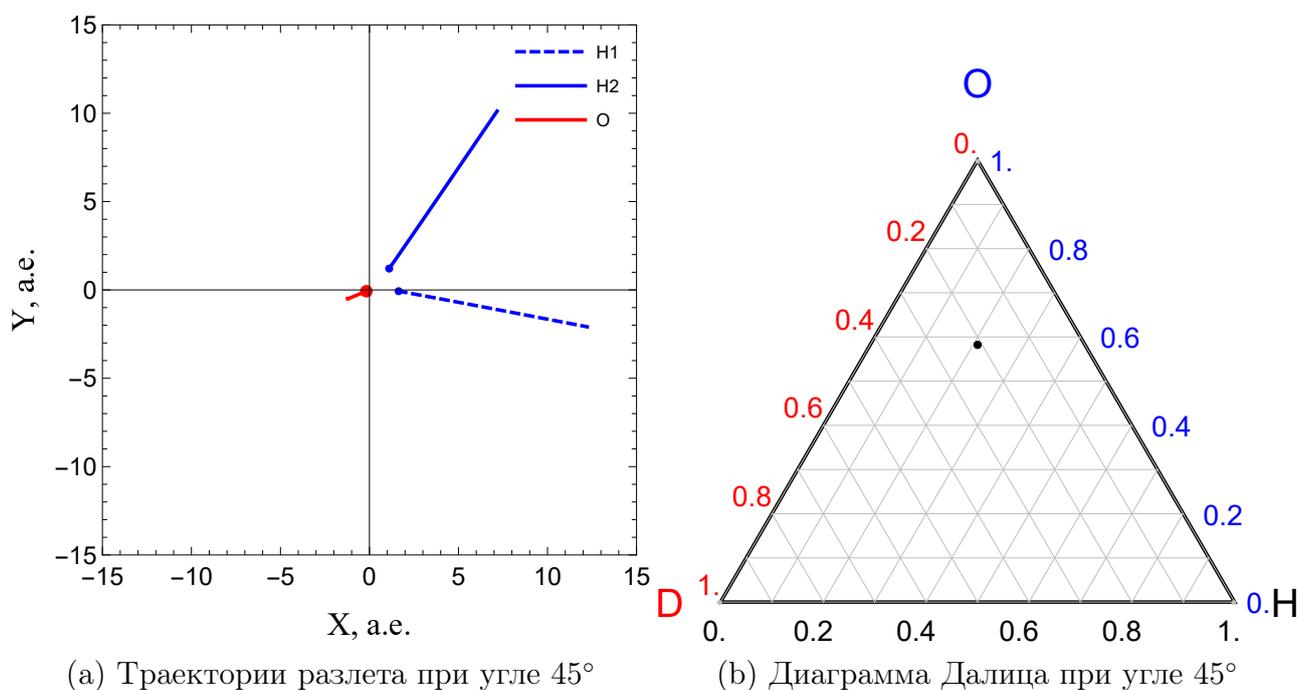
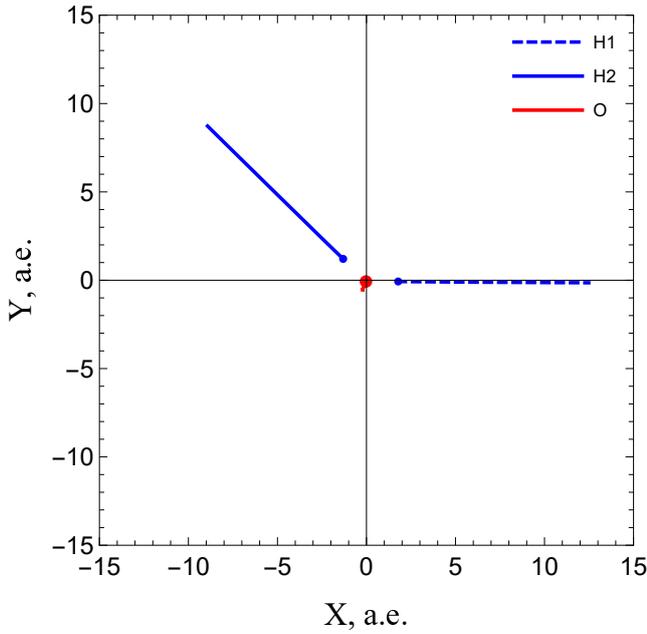


Рис. 1: Траектории разлета и диаграмма Далица для угла 45° . Разлет промоделирован на временном интервале 5 фемтосекунд. Заряды частиц $Z_0 = 8, Z_1 = 1, Z_2 = 1$

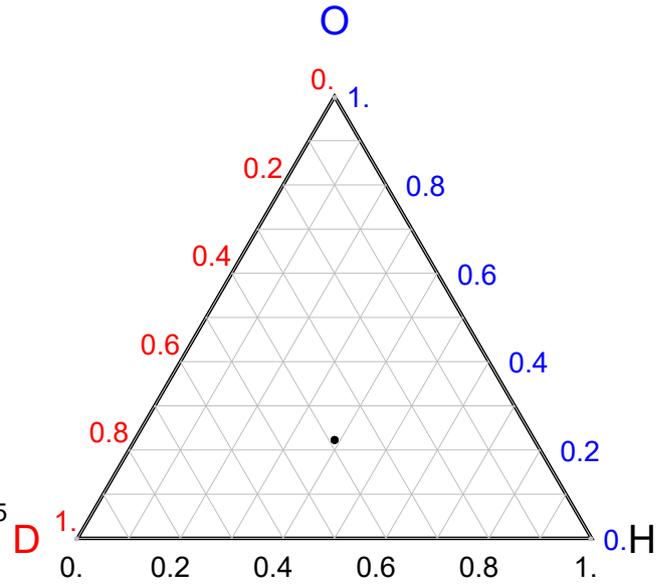
Если же изменять не только угол, но и расстояние между частицами, симметрия потеряется (рис.3b).

Вопрос 2: Пожелание: для удобства обсуждения следует занумеровать все формулы.

Видимо, это недоразумение, так как все необходимые формулы в тексте уже пронумерованы.

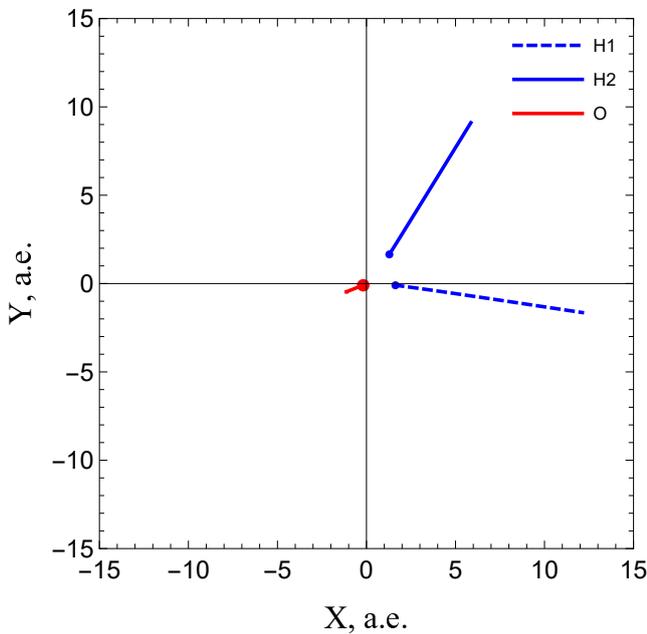


(a) Траектории разлета при угле 135°

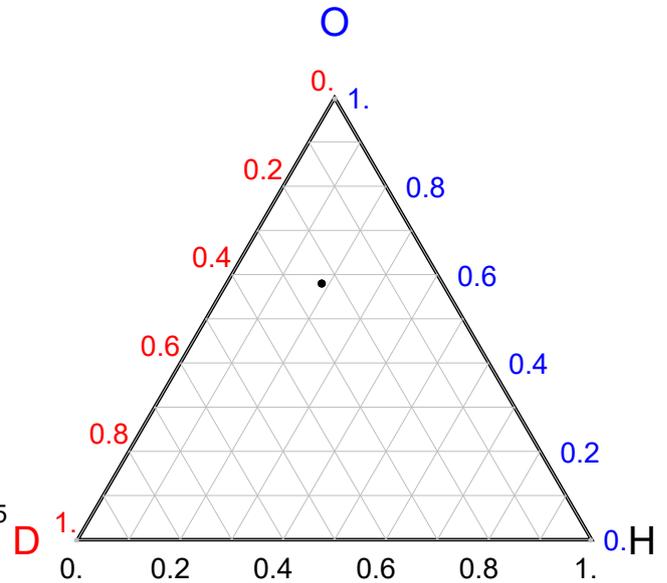


(b) Диаграмма Далица при угле 135°

Рис. 2: Траектории разлета и диаграмма Далица для угла 135° . Разлет промоделирован на временном интервале 5 фемтосекунд. Заряды частиц $Z_0 = 8, Z_1 = 1, Z_2 = 1$



(a) Траектории разлета при изменении расстояния между одним протоном и ядром кислорода



(b) Диаграмма Далица при изменении расстояния между одним протоном и ядром кислорода

Рис. 3: Траектории разлета и диаграмма Далица при изменении расстояния между одним протоном и ядром кислорода. Разлет промоделирован на временном интервале 5 фемтосекунд. Заряды частиц $Z_0 = 8, Z_1 = 1, Z_2 = 1$

Вопрос 3: В первой ссылке указано «личная беседа» — это настолько уникальное и недавнее событие, что других источников указать невозможно?

Вы правы — это уникальное и недавнее событие. Измерения были проведены на Европейском РЛСЭ летом 2019-го года группой университета Сорбонны. В данный момент публикация по эксперименту только готовится. Мы знакомы с результатами благодаря сотрудничеству с этой группой.

Вопрос 4: В заключении к работе говорится о том, что «Сравнение с ожидаемыми экспериментальными данными, которые можно получить с использованием «реакционного микроскопа» COLTRIMS (COLD Target Recoil Ion Momentum Spectrometer)[6], должно показать, насколько адекватно простая классическая модель разлета трех заряженных фрагментов позволяет описать кулоновский взрыв реальных молекул.». Вопрос: проводилось ли такое сравнение? Каковы его результаты? В каком смысле оказалось, что «... Проведенные оценки показали, что вкладом этих взаимодействий можно пренебречь» (магнитной силой Лоренца, спин-орбитальным, спин-спиновым взаимодействиями)?

Нет, до такого сравнения требуется дополнить и расширить модель, как сказано в заключении к работе. Более того, данные эксперимента, как говорилось в ответе на вопрос 1, все еще не опубликованы. Сравнение предполагается включить в работу над магистерской диссертацией.

Вкладом взаимодействий действительно можно пренебречь. Будем рассматривать силы, действующие на протон со стороны кислорода. Сила кулоновского взаимодействия выразится формулой

$$\mathbf{F}_{\text{кул}} = \frac{Z_1 Z_0 (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0)}{m_1 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0|^3}, \quad (1)$$

где Z_1, Z_0 — заряды протона и кислорода соответственно, m_1 — масса протона, $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_0$ — расстояния от центра масс до протона и кислорода соответственно.

Для силы Лоренца справедлива формула

$$\mathbf{F}_{\text{маг}} = \frac{Z_1}{c} [\mathbf{v}_1 \times \mathbf{H}_{10}] = \frac{Z_1 Z_0}{c^2} \frac{1}{r_{10}^3} [\mathbf{v}_1 \times [\mathbf{v}_0 \times \mathbf{r}_{10}]], \quad (2)$$

где \mathbf{H}_{10} — магнитное поле между протоном и кислородом, \mathbf{r}_{10} — расстояние между протоном и кислородом, r_{10} — его модуль, $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_0$ — скорости протона и кислорода соответственно.

Для спин-орбитального взаимодействия запишем формулу

$$\mathbf{F}_{ls} = -\nabla_{\mathbf{r}} \left(g \mu_p \frac{Z_1 Z_0}{m_1 c} \frac{1}{r_{10}^3} (\mathbf{s} \cdot [\mathbf{r}_{10} \times \mathbf{v}_0]) \right), \quad (3)$$

где g — гиромагнитное отношение, μ_p — ядерный магнетон Бора, \mathbf{s} — спин протона.

На рис.4 построен график изменения вышеназванных сил с течением времени. Видно, что силы Лоренца и спин-орбитального взаимодействия меньше силы кулоновского на 5–7 порядков. Сила спин-спинового взаимодействия протонов заведомо меньше спин-орбитального. Поэтому в работе они не рассматриваются.

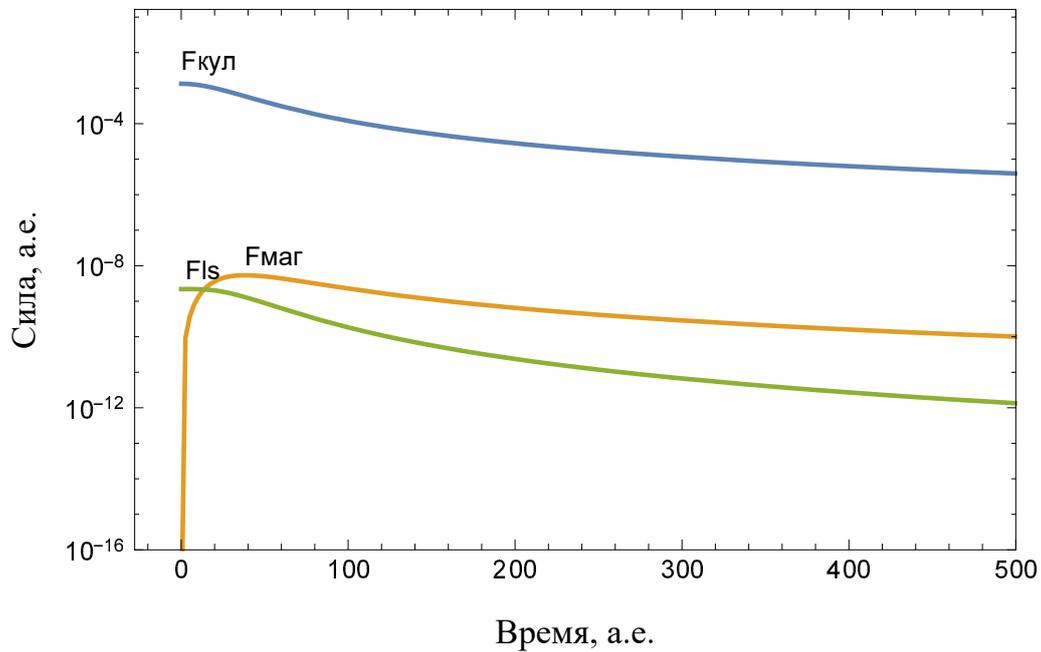


Рис. 4: Сравнение сил кулоновского, магнитного и спин-орбитального взаимодействий, действующих на протон со стороны кислорода. Заряды частиц $Z_0 = 8, Z_1 = 1$