

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
имени М. В. ЛОМОНОСОВА

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

**КУЛОНОВСКИЙ РАЗЛЕТ ТРЕХАТОМНОЙ  
МОЛЕКУЛЫ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ИЗЛУЧЕНИЯ  
РЕНТГЕНОВСКОГО ЛАЗЕРА НА СВОБОДНЫХ  
ЭЛЕКТРОНАХ**

Выполнил студент 413 группы С. З. Пирчхадзе  
Научный руководитель: А. Н. Грум-Гржимайло

Москва, 2020.

# 1 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  $\text{H}_2\text{O}$ , 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  $\text{H}_2\text{O}$  разлетаются три положительно заряженные частицы. В начальной конфигурации атомы водорода присоединены к атому кислорода, образуя угол  $104.45^\circ$  между связями (рис. 1). Вследствие этого могут наблюдаться эффекты, отсутствующие при линейном расположении ядер атомов (например, в молекуле углекислого газа  $\text{CO}_2$ ). 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.

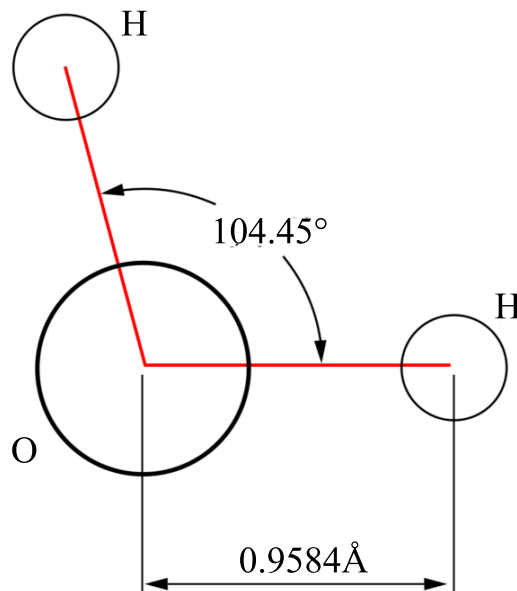


Рис. 1: Схематическое изображение молекулы воды  $\text{H}_2\text{O}$

## 2 Задача трех отталкивающихся кулоновских центров

Задачу разлета трех массивных кулоновских центров будем решать в рамках классической нерелятивистской механики, используя в качестве примера молекулу  $\text{H}_2\text{O}$ .

Кулоновское взаимодействие между тремя частицами запишем в виде

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

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

$$m_0 \frac{d^2 \mathbf{r}_0}{dt^2} = -\nabla_0 U(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (2)$$

$$m_1 \frac{d^2 \mathbf{r}_1}{dt^2} = -\nabla_1 U(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (3)$$

$$m_2 \frac{d^2 \mathbf{r}_2}{dt^2} = -\nabla_2 U(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (4)$$

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.

Полученная система дифференциальных уравнений движения решалась с использованием программного пакета Wolfram Mathematica. Для молекулы  $\text{H}_2\text{O}$  траектории первоначально покоящихся частиц при разлете практически прямолинейны (рис.2).

## 3 Диаграммы Далица

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

$$\begin{cases} T_0 + T_1 + T_2 = Q, \\ \mathbf{P}_0 + \mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2 = 0 \end{cases} \quad (5)$$

где  $Q$  — энергия распада (в случае распада  $\text{H}_2\text{O}$  — 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.

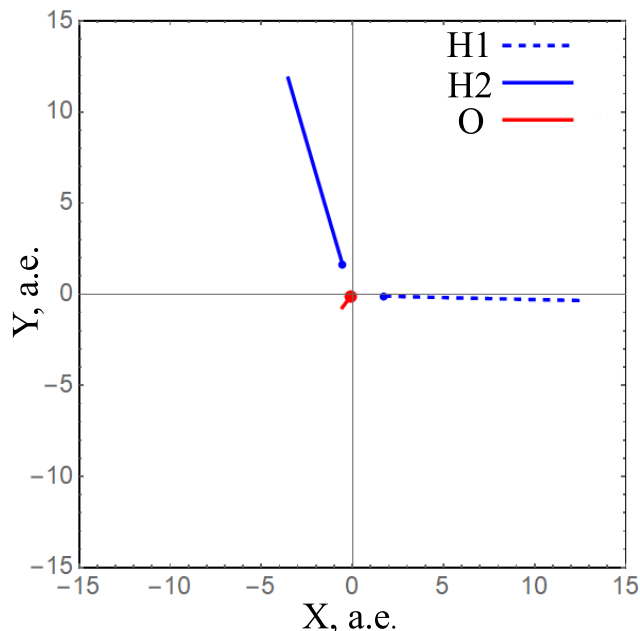


Рис. 2: Траектории разлета протонов H1 и H2 и ядра кислорода O в результате кулоновского взрыва молекулы  $\text{H}_2\text{O}$  ( $Z_0 = 8, Z_1 = 1, Z_2 = 1$ ). Начало координат расположено в центре масс. Разлет промоделирован на временном интервале 5 фемтосекунд

Для реакции распада диаграмму Далица в плоскости можно определить как область, в которой выполняются законы сохранения энергии-импульса [3]. Для молекулы воды  $\text{H}_2\text{O}$  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. Здесь и далее за высоту равнобедренного треугольника (рис.3) берется единица, а расстояние от любой точки внутри треугольника до сторон определяется формулой  $\left(\sum_{i=0}^2 |\mathbf{P}_i|^2\right)^{-1} |\mathbf{P}_i|^2$ , где  $i = 0, 1, 2$ .

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  $\text{H}_2\text{O}$  постепенно и следует рассматривать случаи зависящих от времени зарядов. На диаграмме (рис.3) отображены случаи с различными зарядами иона кислорода  $\text{O}^{i+}$ , где  $i = 0, 1, \dots, 8$ . Мы ожидаем в экспериментально измеренных диаграммах Далица ясный вертикальный след от событий с вылетом двух протонов 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

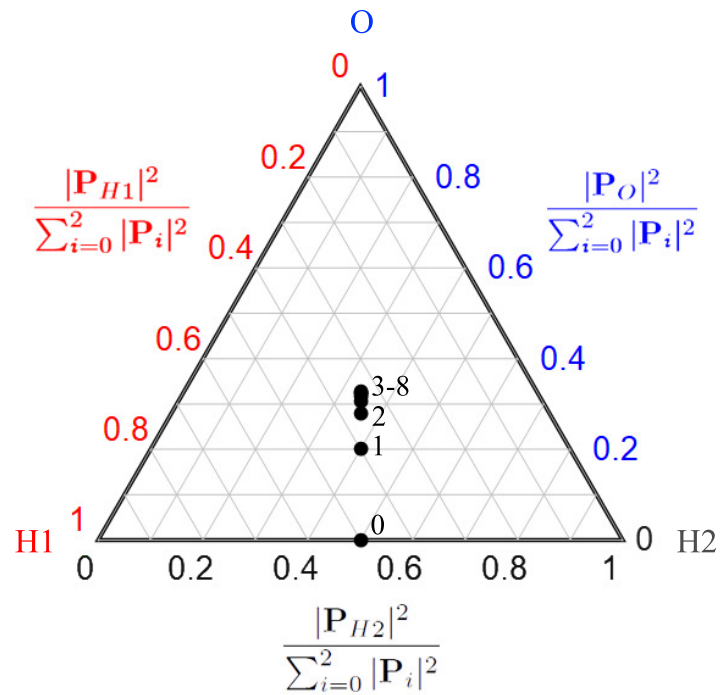


Рис. 3: Диаграмма Далица для кулоновского взрыва молекулы H<sub>2</sub>O для различных зарядов вылетающего иона кислорода O<sup>i+</sup> (цифрами показаны значения  $i = 0, 1, \dots, 8$ )

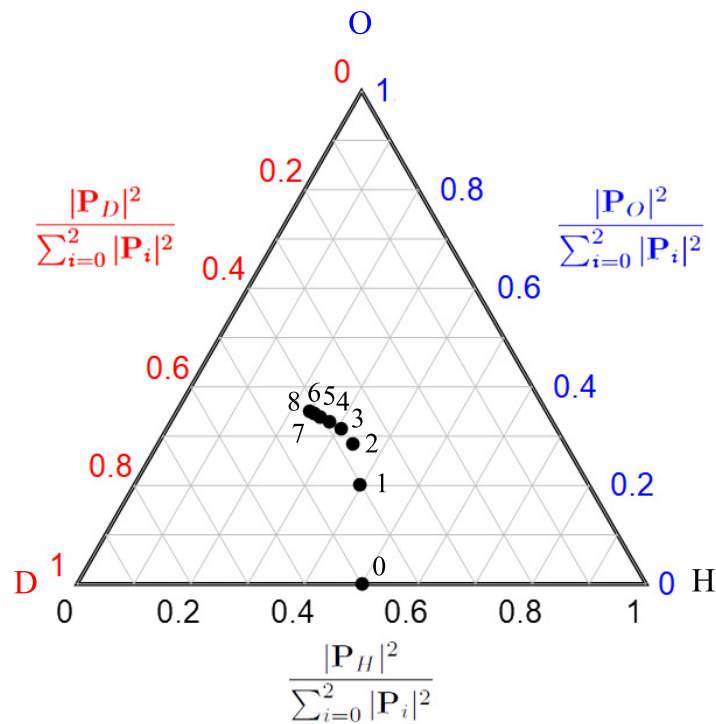


Рис. 4: Диаграмма Далица для кулоновского взрыва молекулы HDO для различных зарядов вылетающего иона кислорода O<sup>i+</sup> (цифрами показаны значения  $i = 0, 1, \dots, 8$ )

показывает, что с увеличением заряда вылетающего иона кислорода все бо-

лее заметно становится влияние разности масс вылетающих дейтрона и протона.

## 4 Учет зависимости зарядов водорода от времени

Как было сказано ранее, при воздействии рентгеновского импульса электроны покидают оболочку молекулы постепенно. Для описания последовательной ионизации атомов водорода была использована программа, реализованная как блок tff (time dependent formfactors) в рамках программно-методического комплекса обработки данных по структуре биомолекулярных объектов [4]. У иона водорода существуют только две электронные конфигурации  $1s^1$  и  $1s^0$ . Переход между ними осуществляется только посредством фотоионизации пучком рентгеновского излучения. Полное сечение фотоионизации одного  $1s$  электрона выражается формулой (6) [5]

$$\sigma = \frac{2^9 \pi^2}{3Zc} \left( \frac{I_{1s}}{\omega} \right)^4 \frac{\exp(-4\xi \operatorname{arccotg} \xi)}{1 - \exp(-2\pi\xi)} \quad (6)$$

, где  $Z$  — заряд атома водорода,  $I_{1s}$  — энергия ионизации атома водорода,  $\omega$  — частота фотонов в пучке,  $\xi = Z/p$ ,  $p$  — импульс фотонов.

Программа позволяет получить зависимость среднего заряда атомов, а также нормированное среднее количество ионов каждого заряда от времени. На основании этих данных можно смоделировать эксперимент по последовательной ионизации молекулы воды. В данной работе рассчитывается зависимость зарядов ионов водорода от времени, а заряд атома кислорода берется фиксированным. Модель строится следующим образом. Время действия входящего импульса фотонов делится на промежутки  $\Delta t$ . Для каждого такого промежутка рассчитывается нормированное на единицу количество нейтральных атомов и ионов с зарядом  $Z = 1$ . Количество ионов же берется за вероятность фотоионизации в этот промежуток времени. Затем программа на языке Wolfram Mathematica высчитывает заряд каждого из двух ионов водорода в отдельности, сохраняя время ионизации,  $N$  раз. Таким образом моделируется  $N$  уникальных экспериментов по фотоионизации молекулы воды. На рис.5 изображены диаграммы Далица для моделирования  $N = 15$  случаев ионизации для нескольких значений заряда иона кислорода. Так как теперь водород ионизируется не мгновенно, ион кислорода успевает забрать большую часть импульса, поэтому распределение отличается от рис.3.

Вновь обратимся к случаю «полутяжелой» воды, где один протон в атоме водорода заменен на дейтрон. На рис.6 изображены диаграммы Далица для моделирования  $N = 15$  случаев ионизации. Как и ожидалось, наблюдается нарушение симметрии в распределении импульсов дейтрона и протона. Тем не менее, кислород также забирает большую часть импульса.

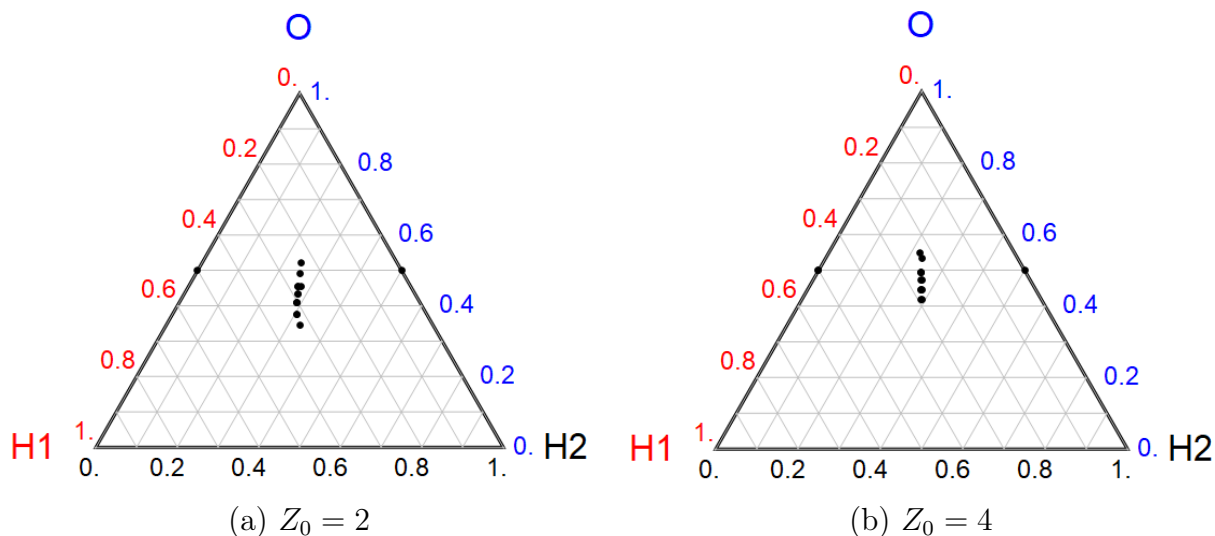


Рис. 5: Диаграммы Далица для кулоновского разлета молекулы воды  $\text{H}_2\text{O}$  при фиксированных зарядах кислорода с учетом временной зависимости зарядов водорода. Плотность потока  $I = 9 \cdot 10^4 \text{ ф/Å}^2$ . Длительность импульса 25 фс.

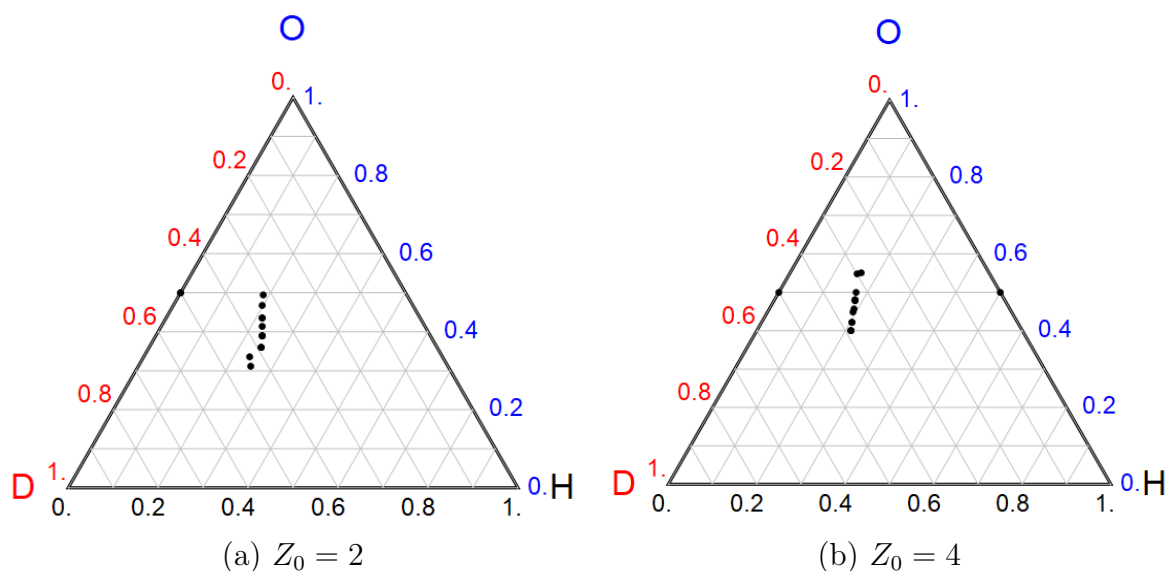


Рис. 6: Диаграммы Далица для кулоновского разлета молекулы полутяжелой воды  $\text{HDO}$  при фиксированных зарядах кислорода с учетом временной зависимости зарядов водорода и дейтрона. Плотность потока  $I = 9 \cdot 10^4 \text{ ф/Å}^2$ . Длительность импульса 25 фс.

## 5 Заключение

Представленная модель может быть развита во многих отношениях, например, введением распределения атомов в молекуле по начальным скоростям, учетом зависимости заряда иона кислорода от времени, учетом первоначальных молекулярных связей между атомами, переходом к более сложным группам симметрии и т.д. Сравнение с ожидаемыми экспериментальными данными, которые можно получить с использованием «реакционного мик-

роскопа» 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.

## Список литературы

- [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] *Крупянский Ю.Ф., Лунин В.Ю., Грызлова Е.В., Балабаев Н.К., Грум-Гржимайло А.Н., Степанов А.С., Сеницын Д.О., Терешкина К.Б., Абдулнасыров Э.Г., Петрова Т.Е.* // Экспериментальный образец - элемент программно-методического комплекса обработки данных по структуре биомолекулярных объектов. Свидетельство о регистрации программы 2013614677. 20 мая 2013.
- [5] *Амусья М.Я.* // Атомный фотоэффект — М. Наука. 1987.
- [6] *Ulrich J., editor* // Ten Years of COLTRIMS and Reaction Microscopes. Max-Planck-Institute für Kernphysik. Heidelberg. 2004.