

Динамика разлета молекулы воды в высокочастотном электромагнитном поле

Е.В. Грызлова, А.Н. Грум-Гржимайло, М.М. Попова, М.Д. Киселев
(ОЭПВАЯ)

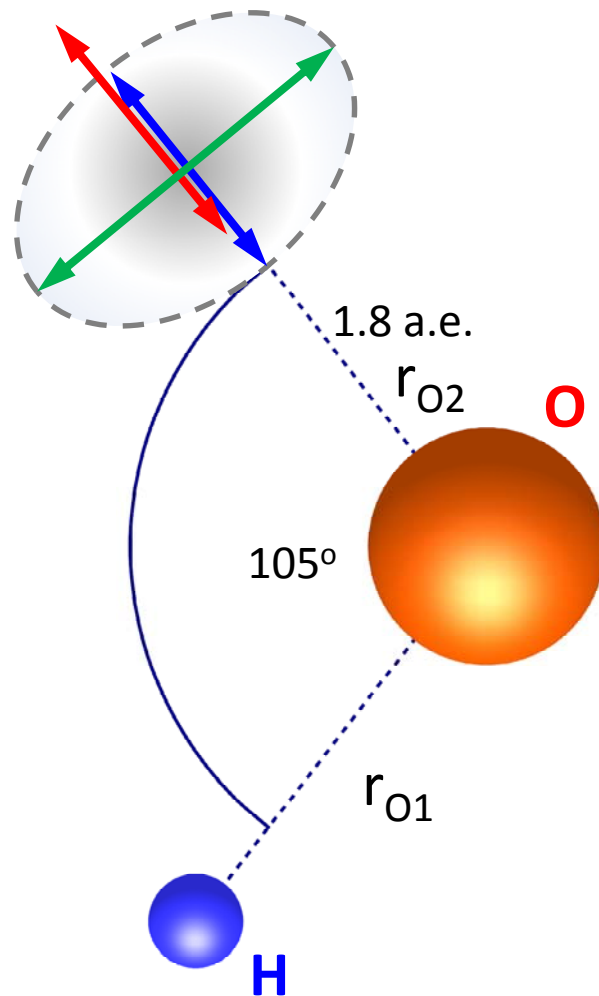
А.В. Бибииков, С.Н. Юдин
(ОФАЯ)



24 февраля 2025, Москва, Россия

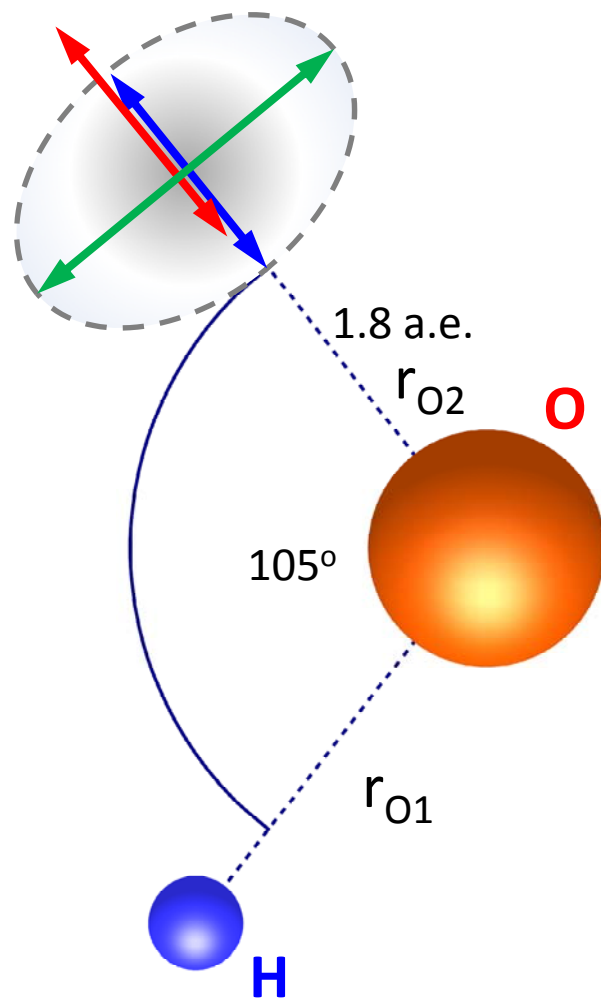
Научная конференция НИИЯФ МГУ по итогам 2022 года

Постановка задачи

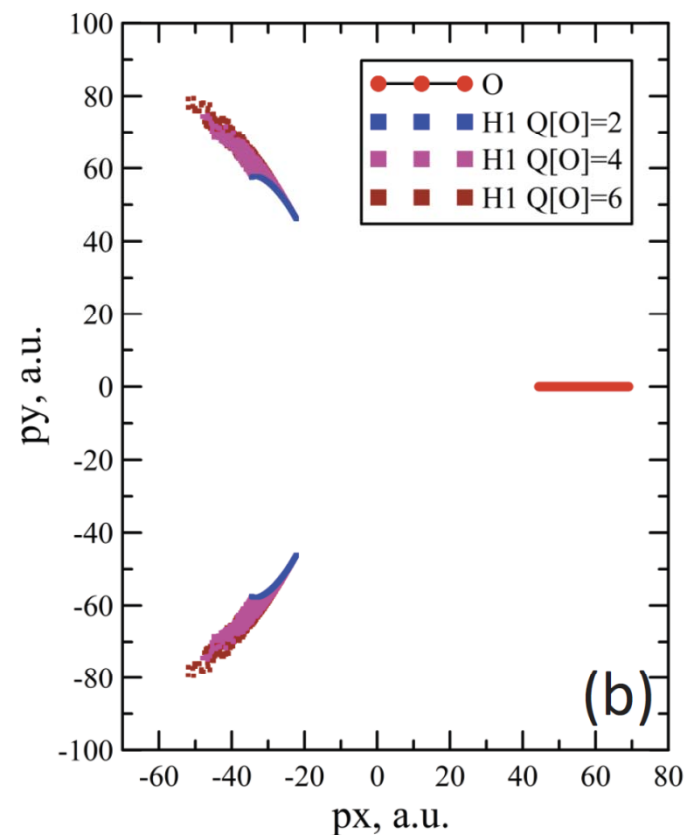


Облучение молекулы воды
высокочастотным электромагнитным полем
и регистрация протонов (ионов водорода) и
ионов кислорода на совпадение

Постановка задачи



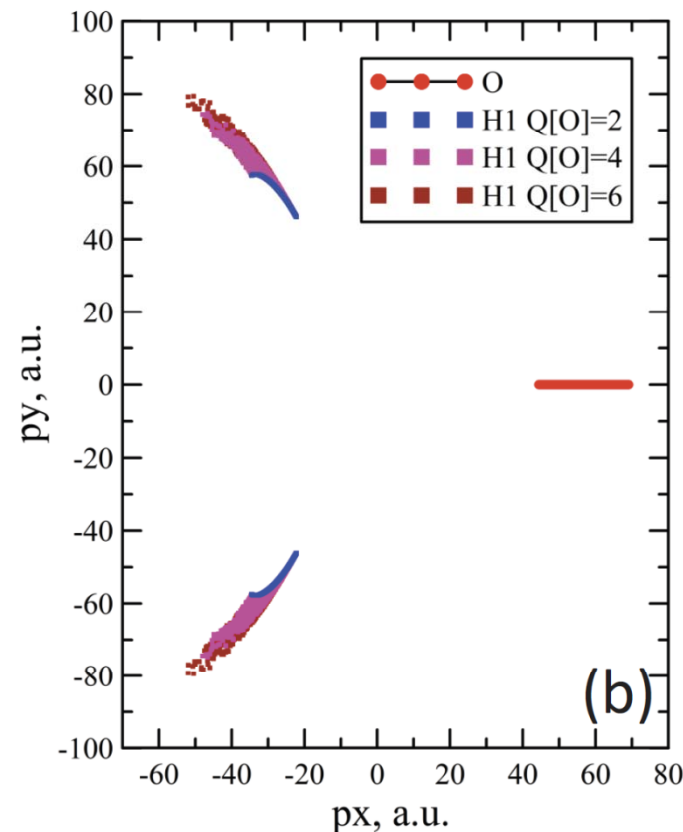
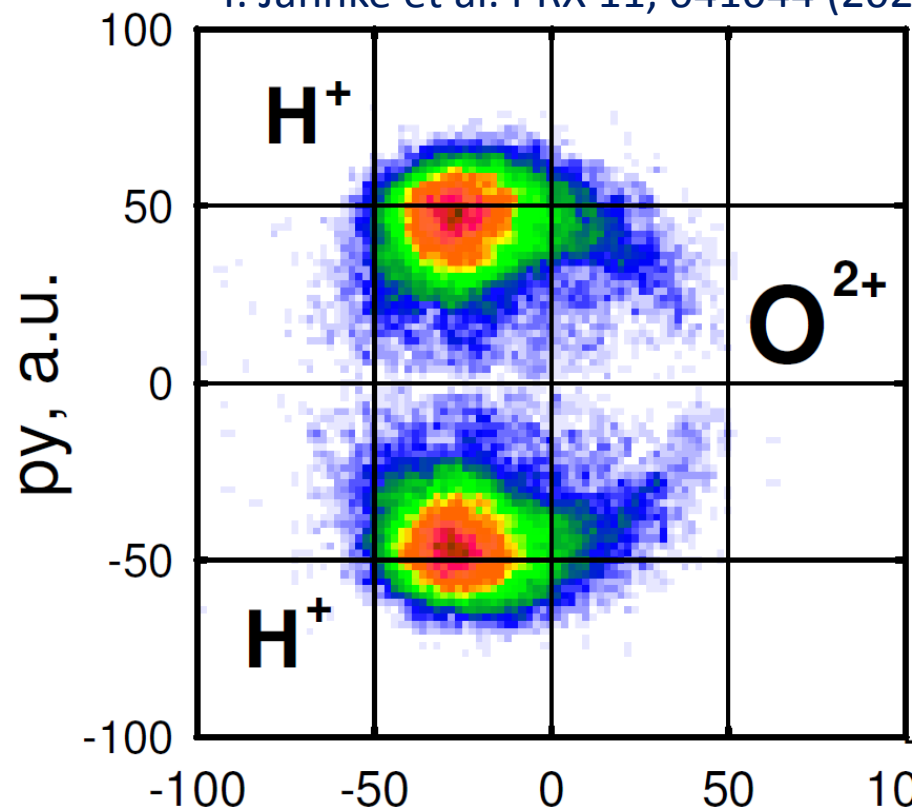
✓ Расчет скоростей всех переходов, возможных для нейтральной молекулы воды и молекулярных ионов, а также ионов кислорода до состояния $\text{O}8+$: Оже-распады, фотоионизация и флуоресценция.



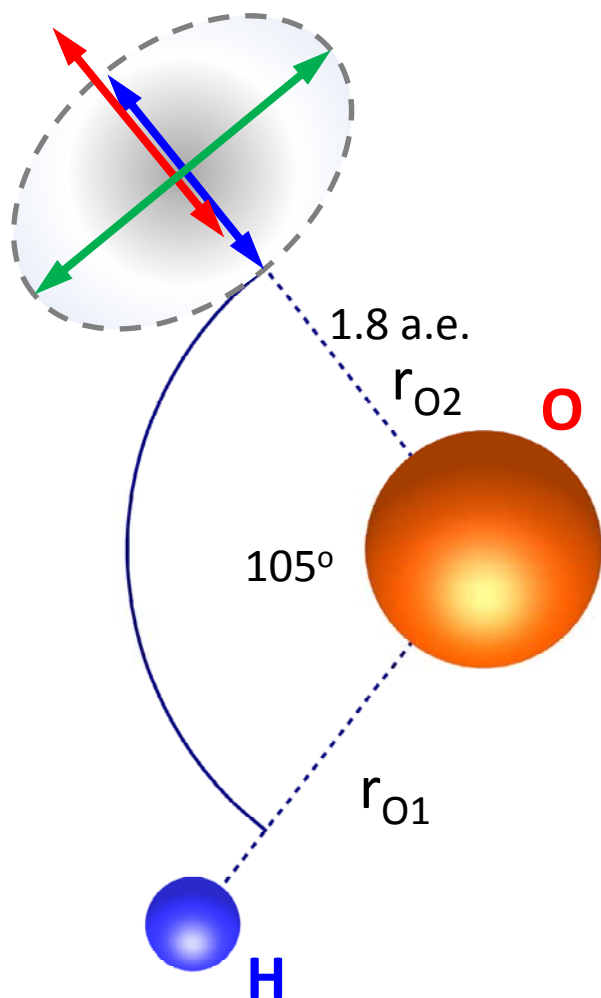
Сравнение с экспериментом

✓ Расчет скоростей всех переходов, возможных для нейтральной молекулы воды и молекулярных ионов, а также ионов кислорода до состояния $O8+$: Оже-распады, фотоионизация и флуоресценция.

T. Jahnke et al. PRX 11, 041044 (2021)



Постановка задачи

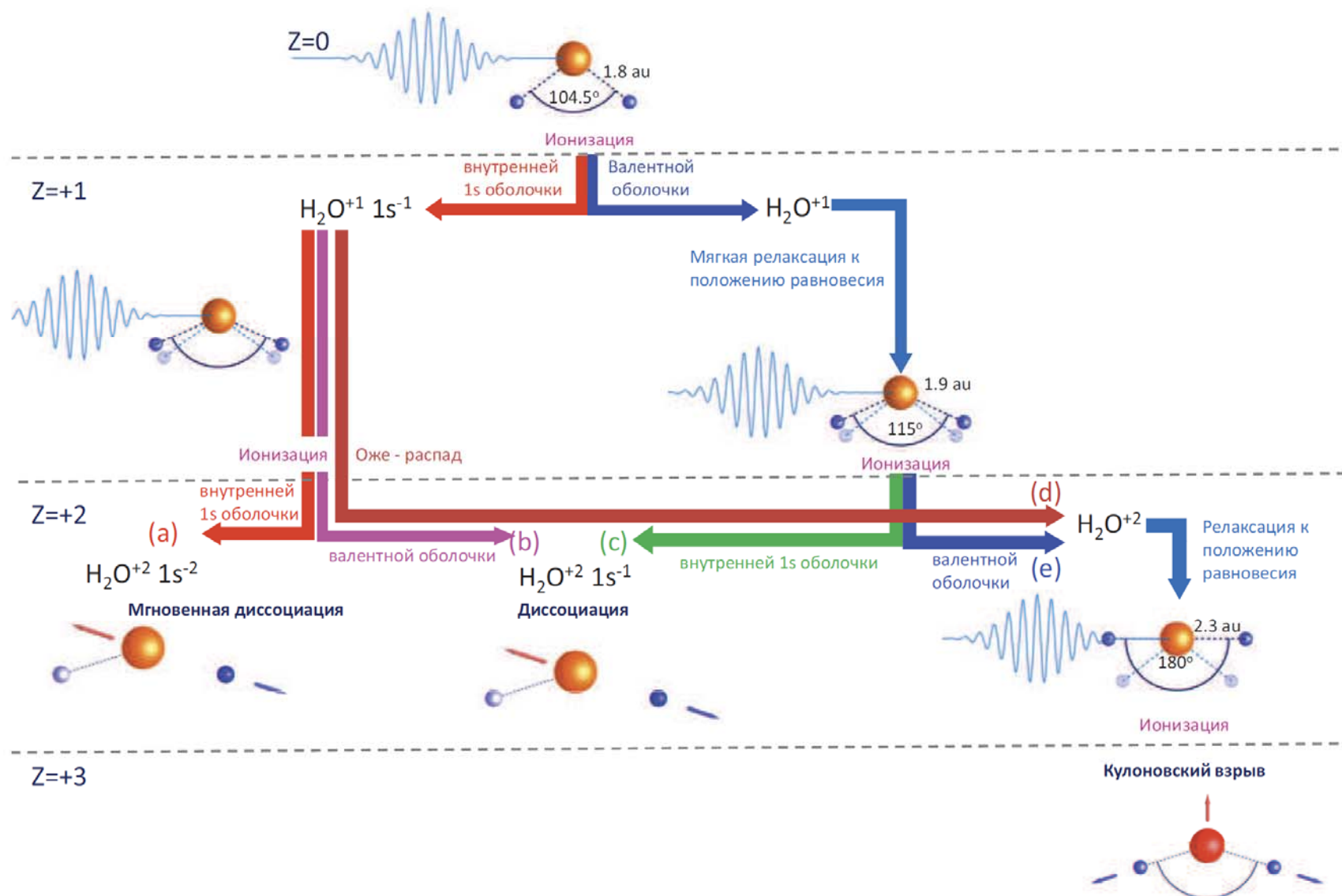


Облучение молекулы воды
высокочастотным электромагнитным полем
и регистрация протонов (ионов водорода) и
ионов кислорода на совпадение

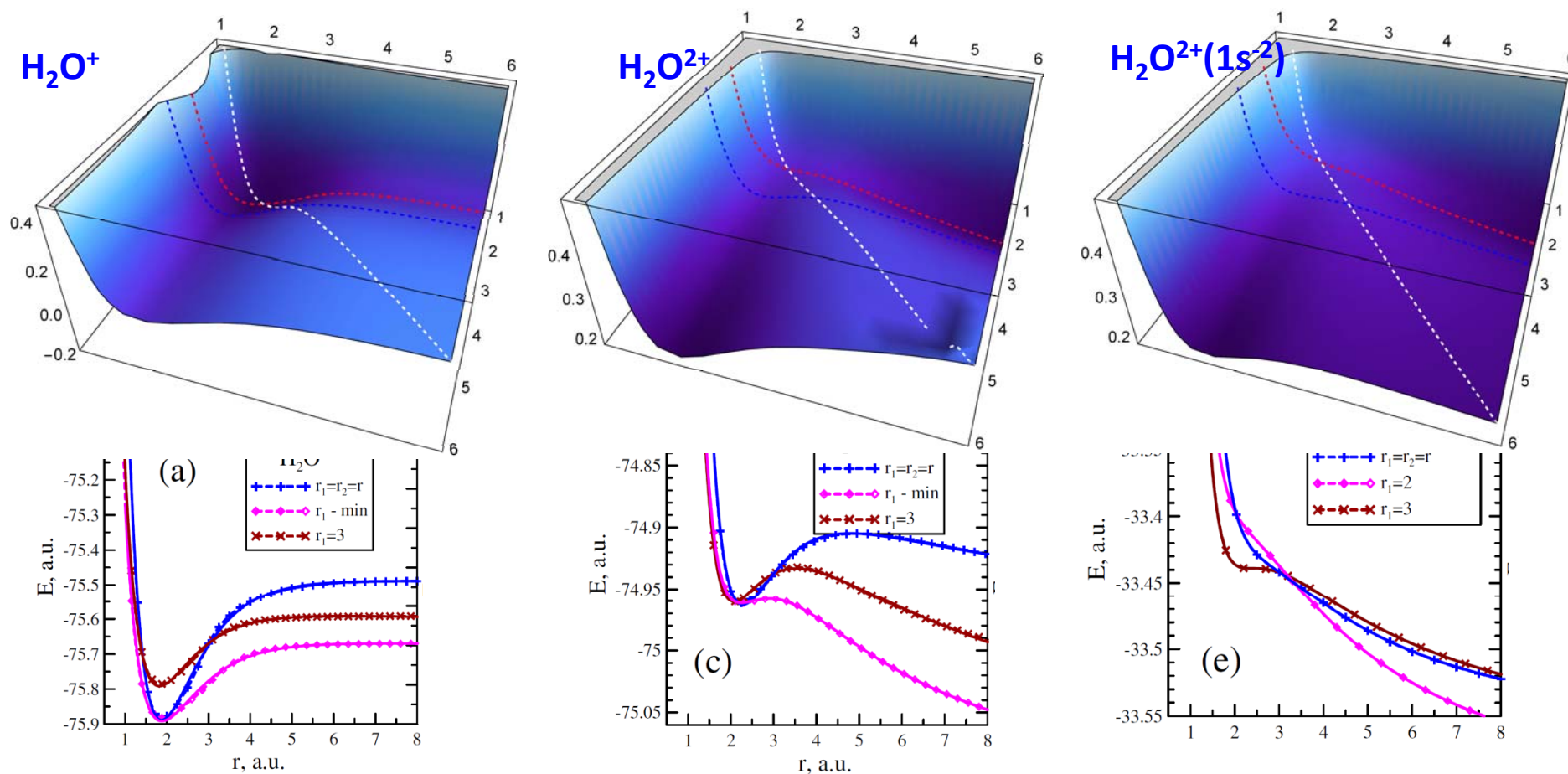
- ✓ Расчет скоростей всех переходов, возможных для нейтральной молекулы воды и молекулярных ионов, а также ионов кислорода до состояния O^{8+} : Оже-распады, фотоионизация и флуоресценция.
- ✓ Расчет поверхностей потенциальной энергии для исследования изменения геометрии молекулы
- ✓ Расчет динамики разлетающихся фрагментов.

Постановка задачи

Эволюция молекулы воды



Расчеты ППЭ



A. Artemyev, A. Bibikov, V. Zayets, and I. Bodrenko, J. Chem. Phys. 123, 024103, (2005).

E. V. Tkalya, A. V. Bibikov, and I. V. Bodrenko, Phys. Rev. C 81, 024610, (2010).

E.V. Tkalya, A.V. Avdeenkov, A.V. Bibikov, I.V. Bodrenko, A.V. Nikolaev, PRC, 86, 014608, (2012).

A.V. Bibikov, A.V. Avdeenkov, I.V. Bodrenko, A.V. Nikolaev, E.V. Tkalya, PRC 88, 034608, (2013).

Уравнения движения

Движение частицы в потенциале

$$\frac{d\mathbf{p}_1}{dt} = -\partial_{r_{01}} \mathcal{P} \frac{\mathbf{r}_{01}}{r_{01}} - \partial_f \mathcal{P} \left(\frac{\mathbf{r}_{02}}{r_{01} r_{02}} - f \frac{\mathbf{r}_{01}}{r_{01}^2} \right) ,$$

$$\frac{d\mathbf{p}_2}{dt} = -\partial_{r_{02}} \mathcal{P} \frac{\mathbf{r}_{02}}{r_{02}} - \partial_f \mathcal{P} \left(\frac{\mathbf{r}_{01}}{r_{01} r_{02}} - f \frac{\mathbf{r}_{02}}{r_{02}^2} \right) ,$$

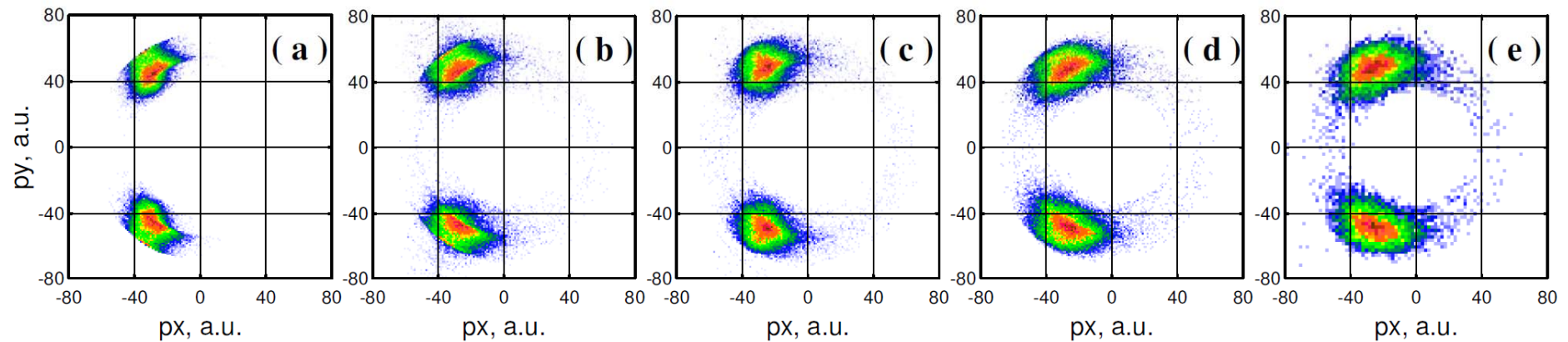
$$\frac{d\mathbf{p}_0}{dt} = -\frac{d\mathbf{p}_1}{dt} - \frac{d\mathbf{p}_2}{dt} .$$

Потенциал

$$\mathcal{P} = V(r_{01}, r_{02}, f) ,$$

$$f = \cos \theta = \frac{\mathbf{r}_{01} \cdot \mathbf{r}_{02}}{r_{01} r_{02}}$$

Результат моделирования



Равновесная
конфигурация

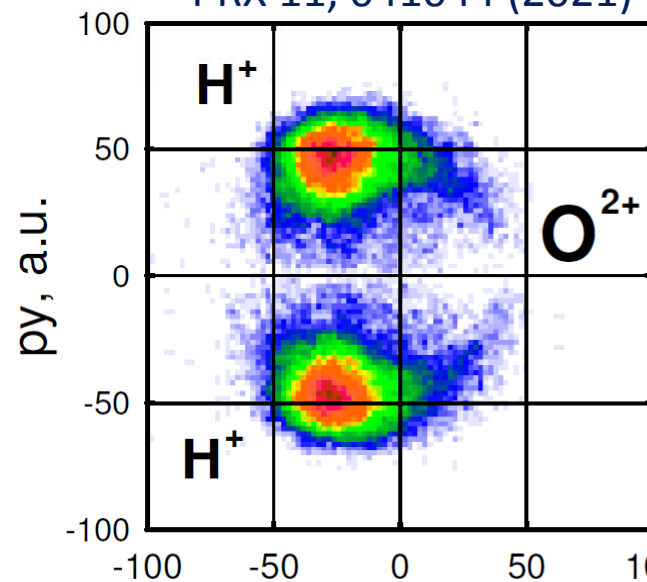
Ножничные

симметричные

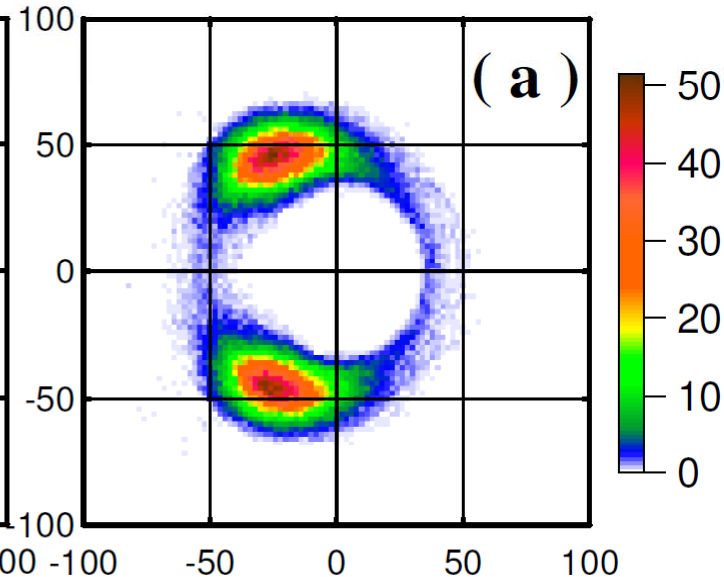
асимметричные

Эксперимент

PRX 11, 041044 (2021)



Теория



Выводы

Получено распределение ионов кислорода по зарядам, промоделированы импульсы, приобретаемые протонами и кислородом после разлета при различных зарядовых траекториях эволюции молекулы.

Все расчеты выполнены для условий, приближенных к эксперименту [[PRX 11, 041044 \(2021\)](#)], и сопоставлены с его результатами. Согласие экспериментальных данных и расчетов показывает применимость предложенного метода.

Рассчитанные и измеренные диаграммы Ньютона демонстрируют максимумы и шлейф событий, соответствующих протону, вылетевшему в ту же полуплоскость, что и ион кислорода. В то время как основные максимумы формируются за счет кулоновского трехчастичного разлета, шлейф определяется различными колебательными модами нейтральной молекулы воды, ее катиона и дикатиона.

Результаты



Динамика разлета молекулы воды в интенсивном поле
высокочастотного излучения
ЖЭТФ, 166, № 6, с. 759-770 (2024)

Vector parameters in atomic ionization by twisted light: Polarization of
the electron and residual ion
PRA, 109, 023108 (2024)

Двухфотонная ионизация одиночных атомов, локализованных на
оси бesselева пучка
ЖЭТФ 120, № 12, с. 917-923 (2024)



The Advantages of Polarization Control in RABBITT
PRA (to be published)

Попова М.М. Когерентный контроль при ионизации атомов
электромагнитными полями кратных частот

Киселев М.Д. Моделирование нелинейных и сверхбыстрых
ионизационных процессов в атомах в мягком рентгеновском и
экстремальном ультрафиолетовом диапазоне

Результаты

