

Рассеяние электронного волнового пакета на молекуле и определение динамики ядерных степеней свободы

Буренков Иван Александрович

студент

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия
ivanburenkov@gmail.com*

Тихонова Ольга Владимировна

доцент, д.ф.-м.н.

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия
ovt@mics.msu.su*

Одной из актуальных проблем физики мощных ультракоротких лазерных импульсов является их использование для исследования динамики атомных и молекулярных систем с предельно высоким пространственным и временным разрешением. В частности, при ионизации молекулы ультракоротким лазерным импульсом происходит фотоотрыв одного из электронов молекулы и последующее его рассеяние на родительском ионе под действием того же интенсивного поля. В результате, угловое распределение рассеянного электрона характеризуется дифракционными пиками, несущими информацию не только о характеристиках электронного волнового пакета, но также о структуре и ориентации родительского молекулярного иона, на котором происходило рассеяние. Таким образом, оказывается возможным по возникающей дифракционной картине отслеживать динамику ядерной подсистемы молекулярного иона с фемтосекундным временным разрешением.

Важной задачей, не решенной на сегодняшний день, является корректное получение информации о ядерном движении из наблюдаемых угловых распределений. Оказалось, что в случае кулоновского поля ядер использование простейших формул дифракции приводит к ошибкам в определении межъядерного расстояния в молекуле вплоть до 50%. Кроме того, использование приближения плоской волны для рассеивающегося электрона не является оправданным в случае рассеяния, возникающего под действием лазерного поля. Поэтому целью данной работы стало получение аналитических выражений, позволяющих извлекать информацию о структуре и ориентации молекулы с высокой точностью.

Для процесса рассеяния электрона на молекулярной системе было получено аналитическое решение за рамками первого борновского приближения и вне приближения плоских волн для рассеивающегося электрона. Были рассмотрены различные типы потенциалов взаимодействия. С учетом когерентности процесса рассеяния на двух потенциальных центрах были получены поправки к положениям минимумов дифракционной картины рассеяния.

Были изучены пределы применимости различных аналитических приближений для различных пространственных ориентаций молекулы. Показано, что «эйканальное» приближение неприменимо для двухатомной молекулы, ориентированной вдоль волнового вектора электрона, в то же время для перпендикулярной геометрии была продемонстрирована важность интерференции между амплитудами рассеяния на отдельных центрах молекулы.

Также проанализирована интерференция падающего и рассеянного электронных потоков и роль этого эффекта в формировании конечного углового распределения: возникающий линейный по потенциалу интерференционный член, оказывается превалирующим на малых углах.

Детальный анализ полученных результатов и сравнение с численным решением точной задачи позволяют в реальном времени получить корректную информацию о динамических характеристиках молекулы из наблюдаемой дифракционной картины.