

## Учёные СФУ предложили «рентгеновские ножницы», способные селективно разрезать молекулы

Учёные Сибирского федерального университета и Института физики ФИЦ КНЦ СО РАН предсказали новое физическое явление — обусловленную эффектом отдачи молекулярную диссоциацию при фотоионизации молекул с помощью жёсткого рентгеновского излучения. В частности, исследователи предсказали, что отдача, испытываемая молекулой водорода при поглощении рентгеновского фотона и вылете фотоэлектрона, приводит к разрыву химической связи молекулы водорода при энергии фотонов больше 5 кэВ. Статья, посвящённая исследованию, опубликована в высокорейтинговом журнале [Physical Review A](#).



*«Эффект отдачи можно наблюдать на примере отката пушки при вылете из неё снаряда (Рис. 1А). Эффект отдачи — это следствие фундаментального закона сохранения импульса (или, иными словами, количества движения). Фундаментальными проявлениями этого эффекта являются эффект Комптона (за его открытие присуждена Нобелевская премия 1927 года), эффект Мёссбауэра (Нобелевская премия за 1961 год) и лазерное охлаждение атомов и молекул (несколько Нобелевских премий).*



*Мы исследовали эффект отдачи при вылете фотоэлектрона в процессе фотоионизации молекулы рентгеновским излучением. При умеренных энергиях фотонов эффект отдачи обусловлен обменом импульса между атомом и вылетевшим из него электроном. В зависимости от направления, в котором вылетает электрон (Рис. 1В и 1С), передача импульса электрону атому приводит к возбуждению в молекуле колебаний и вращений. Оба этих эффекта уже наблюдались нами экспериментально с использованием синхротронного излучения», — сообщил один из авторов исследования, главный научный сотрудник лаборатории нелинейной оптики и спектроскопии (Департамента науки и инновационной деятельности) **Фарис Гельмуханов**.*

Для исследования эффекта отдачи учёным потребовалось провести строгие квантовые расчёты, которые показали, что при увеличении энергии рентгеновского фотона, а, следовательно, и энергии отдачи  $E_{ot}$ , достигаются колебательно-вращательные состояния вблизи порога диссоциации  $ED$ , а при дальнейшем увеличении энергии отдачи ( $E_{ot} > ED$ ) химическая связь разрывается и молекула разрушается. Продолжая аналогию с пушкой и снарядом, можно сказать, что пушка теряет, например, колёса. Разрыв химической связи молекулы водорода  $H_2$ , происходит в области жёсткого рентгеновского излучения при энергиях фотонов, превышающих 5кэВ.

Выяснилось также, что в области жёсткого рентгеновского излучения импульс фотона становится сравнимым с импульсом фотоэлектрона. Это означает, что для описания физики изучаемого явления необходимо учесть даже импульс фотона и привлечь известную всем из школьного курса физики релятивистскую теорию (известную также как теория относительности). Более того, вращательные и поступательные степени свободы становятся сильно перепутанными, что приводит к необходимости описания динамики ядерного волнового пакета вне рамок стандартной теории

возмущений с учётом сильной связи вращательного и трансляционного движений.

Энергии фотонов больше 5 кэВ доступны на всех современных синхротронах, например на синхротронах SOLEIL, SPring-8, MAX-IV, PETRA. Экспериментальная проверка нового обнаруженного сибирскими учёными эффекта планируется на пучке GALAXIES синхротрона SOLEIL во Франции. Наиболее удобным для первого экспериментального наблюдения эффекта является регистрация фрагментов диссоциации молекулы водорода с использованием так называемой времяпролётной (time-of-flight) спектроскопии, где подтверждением эффекта будет служить рост кинетической энергии фрагмента с увеличением энергии фотона. Согласно анализу, уже проведенному в работе, исследованный эффект может быть экспериментально проверен для целого ряда молекул в кластерах инертных газов и молекул, адсорбированных на поверхности.



*«Проделанная работа — это основа для исследования вещества, его структуры, его взаимодействия с синхротронным рентгеновским излучением, а также для учёта исследуемого эффекта при создании новых материалов и технологий. В частности, наши разработки могут быть востребованы в будущих экспериментах на российском синхротроне 4-го поколения СКИФ, который будет построен в*

*Новосибирске. В природе предсказанный эффект может реализовываться в верхних слоях атмосферы, где интенсивность жёсткого рентгеновского излучения достаточно высока. Полагаем, что там наши результаты будут востребованы при планировании новых экспериментов, а значит, они поспособствуют появлению новых прорывных технологий в отечественных рентгеноспектральных исследованиях», —* отметил соавтор работы, ведущий научный сотрудник лаборатории нелинейной оптики и спектроскопии (Департамента науки и инновационной деятельности СФУ) **Сергей Полютов**.

**Рис. 1А.** До выстрела полный импульс системы «пушка-снаряд» равен нулю, так как система находится в покое. После выстрела импульс пушки  $P=Mv$  (произведение массы пушки  $M$  на скорость пушки  $v$ ) должен равняться импульсу снаряда  $mV$  с обратным знаком. Так можно найти скорость пушки и кинетическую энергию пушки (или энергию отдачи):  $E_{ot}=E m/M$ . Это означает, что энергия отдачи ( $E_{ot}$ ) меньше энергии снаряда ( $E$ ) в  $m/M$  раз.

**Рис. 1В** показывает, что при достаточно большой величине импульса отдачи (синяя стрелка), химическая связь может разорваться и молекула диссоциирует (распадается). То же самое может произойти и при вращении, индуцированном отдачей (**Рис. 1С**). Причиной разрыва связи в последнем случае является центробежная сила (**Рис. 1Д**).

Добавим, комплексное развитие направления «спектроскопия и квантовая химия» в СФУ поддержано Проектом 5-100.

[Пресс-служба СФУ](#), 14 февраля 2020 г.

© Сибирский федеральный университет. Редакция сайта: +7 (391) 246-98-60, [info@sfu-kras.ru](mailto:info@sfu-kras.ru).

Адрес страницы: <https://news.sfu-kras.ru/node/22790>