

Untersuchung dreiatomiger Moleküle mithilfe des Dissoziativen Elektroneneinfangs

Lothar Ph. H. Schmidt, Sven Schöblier und Reinhard Dörner

An der Implantationsanlage des IKF wurde seit 2004 eine COLTRIMS-Apparatur für die kinematisch vollständige Vermessung des dissoziativen Elektronentransfers in einfach geladene molekulare Projektile aufgebaut. Das Elektron wird aus einem intern kalten Überschall-Gastrahl eingefangen. In der Regel verwenden wir Helium als Targetgas. Mit einem Rückstoßionenspektrometer wird das bei der Reaktion entstehende He^+ in Koinzidenz dem mit allen neutralen Fragmenten des Projektils nachweisen.

Typischerweise treffen diese innerhalb von einigen 10 ns auf dem Detektor. Mit einer hexagonalen Delay-Line-Anode können trotzdem auch für mehrere Fragmente Ort und Zeit bestimmt werden. Für die Reaktion $10 \text{ kV } \text{H}_2^+ + \text{He} \rightarrow \text{H} + \text{H} + \text{He}^+$ konnten so Interferenzen in der Streuverteilung nachgewiesen werden, welche auf die Zweizentrenstruktur des Wasserstoffmoleküls zurückzuführen sind [1].

Obwohl der Detektor keine Information über die Art des auftretenden Teilchens liefert ist es möglich, die Masse der Fragmente aus den kinematischen Erhaltungsgrößen der Reaktion zu bestimmen. Als erster Test zur Untersuchung von angeregten Zuständen heteronuclearer, dreiatomiger Moleküle wurde der dissoziative Elektronentransfer beim Stoßsystem $\text{D}_2\text{O}^+ + \text{He}$ vermessen.

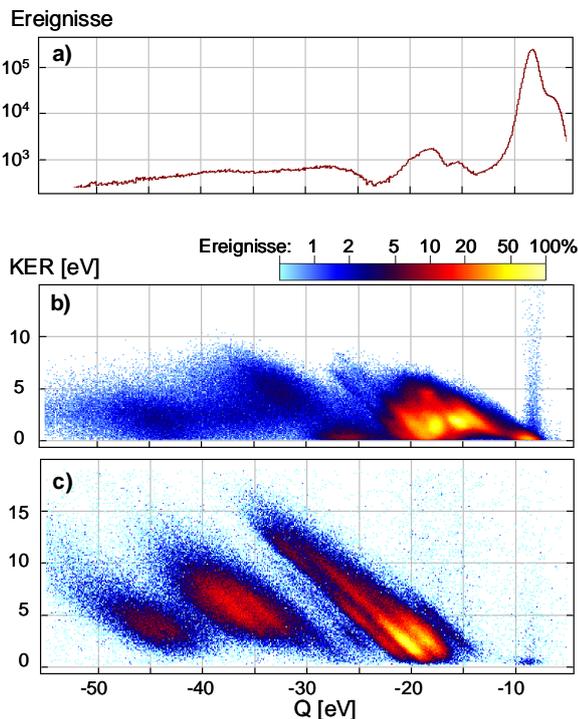


Abbildung 1: Energiediagramme der Reaktionen a) $\text{D}_2\text{O}^+ + \text{He} \rightarrow \text{D}_2\text{O} + \text{He}^+$ b) $\text{D}_2\text{O}^+ + \text{He} \rightarrow \text{DO} + \text{D} + \text{He}^+$ c) $\text{D}_2\text{O} + \text{He} \rightarrow \text{D} + \text{D} + \text{O} + \text{He}^+$. Horizontal ist Änderung der kinetischen Projektilenergie aufgetragen (Q-Wert der Reaktion) und bei den dissoziativen Kanälen vertikal die kinetische Energie der Molekülfragmente in Bezug zu ihrem Schwerpunkt (KER). Die Zahl der Ereignisse ist auf einer logarithmischen Skala dargestellt, wobei das Maximum in c) zehn mal weniger Ereignisse enthält als das in b).

Abb. 1 zeigt ein Energiediagramm, welches die der kinetischen Energie des Projektil entnommene Energie (Q) und, falls Fragmentation stattfindet, die Energie der molekularen Fragmente in Bezug zum Schwerpunkt des Moleküls (KER = kinetic energy release) darstellt

Bei den vollständigen Fragmentation in $\text{D} + \text{D} + \text{O}$ (Abb. 1c) erkennt man mehrere diagonale Linien mit konstanter Summe $Q + \text{KER}$, die verschiedenen elektronischen Anregungszuständen der Fragmente zugeordnet werden können. Die Anregung eines D in die L-Schale 10 eV erfordert, was dem Abstand der Linien entspricht. Die Breite der Linien von ca. 1.5 eV resultiert aus einer Vibrationsanregung im Anfangszustand.

Zur Darstellung des Drei-Teilchen-Aufbruchs kann man den Dartz-Plot [2] verwenden. In diesem werden die Quadrate der Fragmentimpulse in Bezug zum Molekülschwerpunkt (siehe Abb. 2) Jedem Punkt ist dabei ein bestimmter Winkel zwischen den Fragmenten zugeordnet (Abb. 2d). Die Symmetrie in Bezug der vertikalen Achse resultiert aus der Ununterscheidbarkeit der beiden D. Man erkennt, dass das Fragmentationsmuster, sich ändert, wenn man verschiedene Q und KER selektiert, denn davon hängt ab, auf welcher Potentialfläche des Moleküls die Dissoziation stattgefunden hat.

Zehn mal häufiger als die vollständige Fragmentation ist der Aufbruch in $\text{D} + \text{DO}$. Vibrationsanregungen des DO im Endzustand verschmiert hier die Linienstruktur (Abb. 1b).

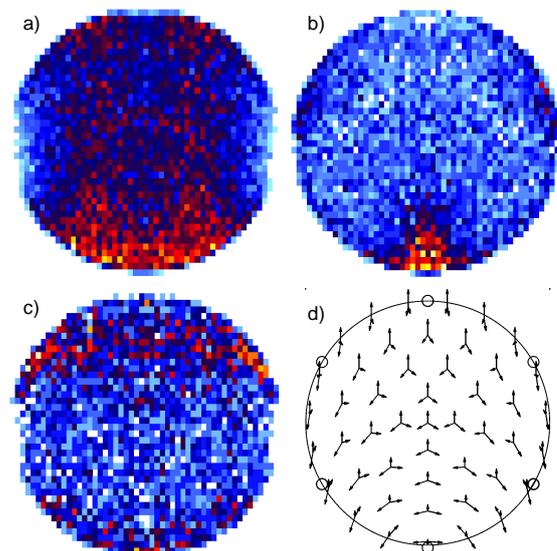


Abbildung 2: Dartz-Plot der Fragmentation in $\text{D} + \text{D} + \text{O}$. Die O-Impulse sind senkrecht aufgetragen. Aus dem Energiediagramm wurden verschiedene Bereiche selektiert: a) $Q = -21 \text{ eV}$, $\text{KER} = 2 \text{ eV}$ b) $Q = -26 \text{ eV}$, $\text{KER} = 6 \text{ eV}$ c) $Q = -23 \text{ eV}$, $\text{KER} = 3 \text{ eV}$. Die Beschränkung der Verteilungen auf einen runden Bereich resultiert aus der Impulserhaltung.

Referenz:

- [1] L.Ph.H. Schmidt et al., Phys.Rev.Lett. 101, 173202 (2008)
- [2] irgendeine Referenz zum Dartzplot