

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЛАБОРАТОРИЯ

Научный отчет за 1995 г.

1. Наиболее значимые результаты за 1995 г.

В результате теоретического анализа и компьютерного моделирования динамики одномерных моделей молекул в двухуровневом приближении электронной подсистемы был разработан алгоритм расчетов на основе метода случайных квантовых скачков и показано, что для случая сильных лазерных полей с интенсивностью порядка $10^{14} - 10^{15}$ Вт/см² он дает правильное количественное описание процесса фотодиссоциации молекулы HCl⁺.

На основе детального исследования динамики классической модели молекулы стильбена, учитывающей все 3N-6=72 колебательные степени свободы, выявлены основные степени свободы, ответственные за процессы цис-транс фотоизомеризации и образования дигидрофенантрена (ДНР). Построена редуцированная 2-мерная модель молекулы стильбена, основанная на полной 3N-6-мерной потенциальной функции и дающая возможность после ее обобщения на 3 и 4 степени свободы отобразить все основные свойства экспериментально наблюдаемых фотоиндуцированных реакций. Детально исследована кинетика реакции в двумерной модели и показано, что для корректного качественного описания изомеризации необходимо введение в качестве дополнительной координаты угла кручения бензольных колец, а точное количественное описание может быть достигнуто только за счет перенормировки точных эффективных масс и/или параметров исходного молекулярного потенциала.

На основе нового метода описания динамики квантовых скачков в системе квазипересекающихся электронных уровней молекулы уточнена качественная картина неадиабатической внутренней конверсии в фотовозбужденных молекулах. В частности, показано, что широко используемое предположение о сохранении полной энергии при квазиклассическом описании молекулы во время скачка неадекватно и в простейшем приближении должно быть опущено либо, при более точном описании, заменено расчетом сдвига по импульсу на основе полученных нами формул. Для сравнения результатов квазиклассического приближения и точных квантовомеханических расчетов создана компьютерная программа расчета квантовой динамики скачков, позволяющая в сочетании с развитыми ранее методами классической молекулярной динамики построить комбинированную квантово-классическую модель, дающую точную 3N-мерную классическую картину динамики, дополненную редуцированной квантовой картиной локальных флуктуаций.

Методика расчета динамики изолированной молекулы стильбена модернизирована для анализа динамики и спектральных свойств молекулы, физически адсорбированной твердой поверхностью. Рассчитаны равновесные положения молекулы на поверхности графитовой подложки, спектры поглощения и флуоресценции и динамика в условиях фотовозбуждения. Показано, что, в то время как линейные спектры в процессе адсорбции, в основном, сохраняют свою структуру, динамика фотовозбужденных реакций претерпевает существенные изменения и распределения характерных времен реакций качественно изменяется. Полученные результаты и созданные алгоритмы дают исходную информацию и методы расчета, необходимые для планируемых экспериментальных исследований методами туннельной микроскопии.

2. Открытия, премии и т. д

нет

3. Статьи, посланные в печать

1. Б.А.Гришанин, В.Н.Задков, В.Д.Вачев, Дж.Фредерик, "Динамика квантовых скачков в фотоиндуцированных процессах в многоатомных молекулах", ЖЭТФ (в печати).
2. V.D.Vachev, B.A.Grishanin, J.H.Frederick, and V.N.Zadkov, "Computer simulation of the photoisomerization dynamics of stilbene", Ultrafast Laser-Induced Chemical Reactions (AIP Proceedings) (1995). (In press).
3. B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, "Molecular dissociation dynamics in intense IR laser field", Laser Interaction and Related Plasma Phenomena (AIP Proceedings) (1995). (In press).
4. B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, V.D.Vachev, and J.H.Frederick, "Potential energy surface hopping algorithms for polyatomic molecules: Theoretical Study", Laser Chemistry, Biophysics and Biomedicine, Edited by V.N.Zadkov, SPIE Proc., Vol. 1402 (1996). (In press).

4. Статьи, вышедшие из печати за отчетный год

1. V.D.Vachev, J.H.Frederick, B.A.Grishanin, V. N. Zadkov, and N. I. Koroteev, "Quasiclassical molecular dynamics simulation of the photoisomerization of stilbene", J. Phys. Chem., Vol. 99, pp. 5247-5263 (1995).

2. B. A. Grishanin, V. N. Zadkov, "Computer simulation of femtosecond molecular dynamics: How to combine quantum and classical approaches?", *Laser Applications in Life Sciences*, P. A. Apanasevich, N. I. Koroteev, S. G. Kruglik, and V. N. Zadkov, Eds, Proc. SPIE, Vol. 2370, pp. 414–427 (1995).
3. B. A. Grishanin, V. N. Zadkov, J. H. Frederick, and V. D. Vachev, "Computer simulation of ultrafast reactions in conjugated molecules", In: *Technical Digest, 15-th Int. Conf. on Coherent and Nonlinear Opt.*, St. Petersburg, Vol. 2, pp. 309–310 (1995).
4. B. A. Grishanin, V. N. Zadkov, "Quantum jumps in molecules excited by intense laser field", In: *Quantum Communication and Measurements*, V. P. Belavkin, O. Hirota and R. L. Hudson, Eds., Plenum, pp. 272–280 (1995).
5. N. Yu. Gubanov, B. A. Grishanin, and V. N. Zadkov, "Reduced models of photoinduced molecule's dynamics: Conjugated molecules analysis", *Technical Digest, 15-th Int. Conf. on Coherent and Nonlinear Opt.*, St. Petersburg, Vol. 2, pp. 349–350 (1995).
6. S. Yu. Kotkov, B. A. Grishanin, V. N. Zadkov, and K. V. Borodin, "Ultrafast dynamics of surface-adsorbed molecules", *Technical Digest, 15-th Int. Conf. on Coherent and Nonlinear Opt.*, St. Petersburg, Vol. 2, pp. 126–127 (1995).
7. S. Yu. Kotkov, V. N. Zadkov, B. A. Grishanin, V. D. Vachev, and J. H. Frederick, "Ultrafast dynamics of surface-adsorbed conjugated molecules", *Laser Techniques for Surface Science II*, SPIE Proc., Vol. 2547, pp. 312–319 (1995).

5. Участие студентов в факультетских, всероссийских и международных совещаниях, конференциях, школах, семинарах, днях науки

1. Н. Г. Губанов, К. В. Бородин — КИНО 95; опубликованы тезисы:
2. B. A. Grishanin, V. N. Zadkov, J. H. Frederick, and V. D. Vachev, "Computer simulation of ultrafast reactions in conjugated molecules", In: *Technical Digest, 15-th Int. Conf. on Coherent and Nonlinear Opt.*, St. Petersburg, Vol. 2, pp. 309–310 (1995).
3. N. Yu. Gubanov (студент), B. A. Grishanin, and V. N. Zadkov, "Reduced models of photoinduced molecule's dynamics: Conjugated molecules analysis", *Technical Digest, 15-th Int. Conf. on Coherent and Nonlinear Opt.*, St. Petersburg, Vol. 2, pp. 349–350 (1995).
4. S. Yu. Kotkov, B. A. Grishanin, V. N. Zadkov, and K. V. Borodin (студент), "Ultrafast dynamics of surface-adsorbed molecules", *Technical Digest, 15-th Int. Conf. on Coherent and Nonlinear Opt.*, St. Petersburg, Vol. 2, pp. 126–127 (1995).

6 Участие в выставках и награды

нет

7. Участие сотрудников, аспирантов и студентов в конференциях и совещаниях в 1995 г.

КИНО-95, Ленинград, 2000 участников

Н. Г. Губанов, К. В. Бородин — КИНО 95; опубликованы тезисы:

N. Yu. Gubanov, B. A. Grishanin, and V. N. Zadkov, "Reduced models of photoinduced molecule's dynamics: Conjugated molecules analysis", *Technical Digest, 15-th Int. Conf. on Coherent and Nonlinear Opt.*, St. Petersburg, Vol. 2, pp. 349–350 (1995).

S. Yu. Kotkov, B. A. Grishanin, V. N. Zadkov, and K. V. Borodin, "Ultrafast dynamics of surface-adsorbed molecules", *Technical Digest, 15-th Int. Conf. on Coherent and Nonlinear Opt.*, St. Petersburg, Vol. 2, pp. 126–127 (1995).

9. Участие сотрудников в азербейных командировках

Б. А. Гришанин, В. Н. Задков - Командировка в Университет г. Рино (США). Цель - написание совместных статей по проделанной ранее совместной работе в рамках гранта НАТО. Выступление с докладом на семинаре лаборатории проф. Дж. Фредерика. Закончены и отправлены в печать 2 статьи и составлен план дальнейшей работы.

Составители отчета:
Б. А. Гришанин, В. Н. Задков