

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЛАБОРАТОРИЯ

Научный отчет за 1997 г.

1. Наиболее значимые результаты за 1997 г.

На основе развитой ранее оригинальной методики моделирования динамики фотовозбужденных многоатомных молекул было проведено исследование динамики адсорбции и фотоизомеризации молекулы стильбена на графитовой поверхности. Теоретически рассчитаны равновесные состояния молекулы с целью последующего сравнения с данными экспериментов по исследованию поверхностно-адсорбированного стильбена методами туннельной микроскопии. Рассчитана статистика выхода различных каналов фотоизомеризации и проанализирована ее специфика по сравнению со свободной молекулой.

В теории резонанса когерентного пленения излучения показано существование принципиального предела ширины резонанса Λ -системы. Теоретически объяснен экспериментально наблюдаемый сдвиг резонанса поглощения. Созданы программы для аналитического и численного расчета спектров флуоресценции многоуровневых атомов.

2. Наиболее значимые результаты за последние 5 лет

Развита оригинальная методика моделирования динамики фотовозбужденных молекул, позволяющая для определения параметров молекулы использовать данные спектров флуоресценции и оптического поглощения. Для изолированной молекулы стильбена обнаружена неизвестная ранее особенность цис-транс фотоизомеризации, заключающаяся в существовании единого для всех продуктов выхода реакции набора трех путей движения на возбужденной потенциальной поверхности, что приводит к наличию соответствующих групп в распределении времен реакции. Развита усовершенствованный метод описания квантовых скачков в процессе внутренней конверсии, обобщающий алгоритм Тулли, и показана его эффективность в применении к стильбену.

3. Список статей и препринтов за 1997 год

1. Б.А. Гришанин, В.Н.Задков, Д.Мешед. Влияние четырехфотонных взаимодействий на когерентное пленение населенностей в Λ -системе, ЖЭТФ, т. 113, N 1, с. 144 (1998).

4. Список докладов и публикаций в трудах конференций за 1997 г.

2. **International Conference on Moving Frontiers in Quantum Molecular Science, Bonn, P2 (1997)**
S.Yu.Kotkov, B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, Comparative study of photoisomerization dynamics in isolated and surface-adsorbed stilbene molecule, In: Technical Digest of the International Conference on Moving Frontiers in Quantum Molecular Science, Bonn, P2 (1997).
3. **Czech-Israeli-German Symposium on Dynamical Processes in Condensed Molecular Systems (DPCMS'97), Prague, May 26-30, 1997**
S.Yu.Kotkov, B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, «Molecular dynamics study of photoinduced reactions in isolated and surface-adsorbed stilbene molecule», In: Technical Digest of the Czech-Israeli-German Symposium on Dynamical Processes in Condensed Molecular Systems (DPCMS'97), Prague, May 26-30, 1997.

5. Информация о грантах, договорах, контрактах

1. Российский Фонд Фундаментальных Исследований
2. N 96-03-032867, Молекулярная динамика фотовозбужденных молекул, адсорбированных на поверхность
3. МЛЦ

6. Особая информация

нет

Составители отчета:

Б. А. Гришанин, В. Н. Задков