

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЛАБОРАТОРИЯ

Научный отчет за 1993 г.

1. Состав научной группы

а. *сотрудники:*

к.ф.-м.н., доцент В.Н.Задков

к.ф.-м.н., ст. преп. Б.А.Гришанин

б. *аспиранты/стажеры*

С.Ю.Котков, стажер МЛЦ МГУ

с. *студенты:*

В.Л.Рыжков, 5 курс

К.В.Бородин, 4 курс

М.Губанов, 4 курс

д. *участие в деятельности общественных и научных организаций:*

В.Н.Задков является членом Совета МЛЦ МГУ, членом Совета физфака по вычислительной технике, членом международных обществ SPIE и BIOS, ученым секретарем редколлегии серии книг Компьютеры в Физике (Изд-во Наука), научным консультантом Российской Энциклопедии.

2. Результаты научной работы за год

Целью данной работы являлось развитие теоретических моделей и создание пакетов компьютерных программ для исследования процессов возбуждения и перераспределения энергии в молекулах, а также процессов диссоциации и ионизации молекул в сверхсильных световых полях. В результате выполнения этой работы получены следующие результаты.

- Завершена работа по созданию пакета программ для исследования молекулярной динамики, индуцированной электронным переходом под действием короткого лазерного импульса умеренной интенсивности. Этот пакет позволяет реализовать большой набор компьютерных экспериментов по фотостимулированным конформационным переходам в молекулах, содержащих несколько десятков атомов. Расчеты основаны на квантовой теории электронного возбуждения в рамках гармонического приближения потенциальной поверхности возбуждаемого терма. Процедура расчетов включает использование экспериментальных спектров поглощения и флуоресценции для определения параметров молекулярного потенциала путем соответствующей подгонки теоретических спектров, рассчитываемых в специально разработанной программе. Применение данного пакета к таким молекулам как антрацен, стильбен, дифторбензол показало эффективность данного пакета при использовании IBM PC и возможность использования в широком спектре компьютерных экспериментов. Полученные пакеты программ адаптированы на компьютер VAX 4000-200, введенном в эксплуатацию в начале 1993-1994 учебного года. Усовершенствованы методы расчета спектров излучения-поглощения за счет повышения точности преобразований, выполняемых на компьютере.
- Создана программа для исследования динамики молекул в процессе возбуждения инфракрасным лазерным излучением. Выполнен цикл расчетов по исследованию процесса фотостимулированной диссоциации молекулы этилена под действием лазерных ИК-импульсов на частоте 949 см^{-1} . Показана эффективность использования частотной модуляции импульса с целью повышения уровня возбуждения. Проанализированы возможные каналы реакции в зависимости от параметров импульса.

- Для исследования динамики молекул в сверхсильных полях, для которых существенна динамика не только ядер, но и электронов, развит метод квантовых скачков, позволяющий использовать классический метод молекулярной динамики для описания движения ядерных координат. Реализована основанная на этом методе компьютерная программа, применимая для расчета одномерных молекул с двумя электронными уровнями. Выполнена серия расчетов для молекулы HCl^+ как с помощью точных квантовых расчетов по соответствующей одномерной модели, так и в модели квантовых скачков. Получены зависимости вероятностей диссоциации в состояния $\text{H}+\text{Cl}^+$ и H^++Cl от интенсивности лазерного поля. Анализ итогов выполненной работы показал возможность использования данной упрощенной модели к анализу больших молекул.
- Совокупность полученных теоретических результатов и разработанных программ предоставляет широкие возможности для постановки новых компьютерных экспериментов для исследования новых физических объектов. В качестве одного из таких практически интересных объектов начата работа по исследованию динамических свойств молекулы стиблена на поверхности графитовой подложки. Получены численные результаты для описания траектории движения в 3N-мерном пространстве для набора типичных начальных условий. Выполнена визуализация динамики на дисплее компьютера. Подготовлены пакеты программ для проведения расчетов спектров поглощения-испускания стиблена на поверхности графитовой подложки.

3. Открытия, премии, etc.

нет

4. Список работ

1. V.D.Vachev, B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, "Molecular dynamics simulation of electronically excited polyatomic molecules", LAMP Series Report, ICTP, LAMP/93/1, pp.1-14 (1993).
2. B.A.Grishanin, V.A.Lobastov, V.M.Petnikova, V.V.Shuvalov, "Theory of the nonlinear response of metals and superconductors to biharmonic excitation", Laser Physics, **3**, pp. 121–130 (1993).
3. B.A.Grishanin, V.D.Vachev, V.N.Zadkov, "Computer modeling of photoinduced dissociation of ethylene molecule by short IR laser pulse", SPIE Proc., 1921, Ed. Jouko Korppi-Tommola, pp.386-390 (1993).
4. B.A.Grishanin, V.D.Vachev, V.N.Zadkov, "MD investigation of photoinduced transformations in organic molecules", *ibid.*, pp.391-401 (1993).
5. V.D.Vachev, J.H.Frederick, B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, N.I.Koroteev, "Stilbene isomerization dynamics on multidimensional potential energy surface: molecular dynamics simulation", Chem. Phys. Lett., **215**, pp. 306—314 (1993)
6. B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, "Electronically excited molecules: Computer simulation of femtosecond molecular dynamics", Book of Abstracts, 2nd Int. Conf. on Lasers in Chemistry (Eds by G.Denardo, M.El-Sayed, N.Rahman). — Trieste, 1993.
7. B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, "Semiclassical approach to quantum dynamics of a molecule in a superintense IR pulsed laser field", Book of Abstracts, 6th Int. Conf. on Multiphoton Processes (ICOMP VI), SaE6, Quebec City, Canada (1993).
8. B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, "Electronically excited molecules: Computer simulation of femtosecond molecular dynamics", Book of Abstracts, VIII Int. Symp. on Ultrafast Processes in Spectroscopy, Vilnius (1993).

9. B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, "Dynamics of a molecule in a superintense IR-pulsed laser field", in *Quantum Electronics and Laser Science Conference, 1993 OSA Technical Digest Series*, Vol. 3 (Optical Society of America, Washington, DC, 1993), pp. 103–104.
10. B.A.Grishanin, A.Yu.Chikishev, N.I.Koroteev, V.N.Zadkov, "Fast pico- and femtosecond reaction dynamics in the excited states of large molecules: Fluorescence studies and computer simulations", In: *Femtosecond Reaction Dynamics* (Amsterdam: Elseiver, 1993) (in press).
11. Б.А.Гришанин, В.Н.Задков, В.Л.Рыжков, "Релаксация двухуровневого атома в поле интенсивного квазимонохроматического лазерного излучения", ВМУ (в печати).

5. Аспиранты и стажеры

С.Ю.Котков, стажер МЛЦ МГУ, получил диплом с.о по Лазерной физике и технике в 1993 г.

6. Участие студентов в конференциях

В.Л.Рыжков участвовал в работе 2-й летней Международной студенческой школы в Финляндии (Juvaskyla), соавтор одной статьи (см. список работ)

7. Выставки, награды

нет

8. Конференции и т.п.

1. 2nd Int. Conf. on Lasers in Chemistry, Trieste, Italy, November 1993, B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, "Electronically excited molecules: Computer simulation of femtosecond molecular dynamics"
2. 6th Int. Conf. on Multiphoton Processes (ICOMP VI), Quebec City, Canada August 1993, B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, "Semiclassical approach to quantum dynamics of a molecule in a superintense IR pulsed laser field"
3. VIII Int. Symp. on Ultrafast Processes in Spectroscopy, Vilnius, Lithuania, October 1993, B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, "Electronically excited molecules: Computer simulation of femtosecond molecular dynamics"
4. Quantum Electronics and Laser Science Conference, Washington, DC, USA, May 1993, B.A.-Grishanin, V.N.Zadkov, "Dynamics of a molecule in a superintense IR-pulsed laser field"
5. Royal Academy of Sciences Symp. on Femtosecond Reaction Dynamics, Amsterdam, the Netherlands, May 1993, B.A.Grishanin, A.Yu.Chikishev, N.I.Koroteev, V.N.Zadkov, "Fast pico- and femtosecond reaction dynamics in the excited states of large molecules: Fluorescence studies and computer simulations"

9. Учебные пособия, книги и т.п.

Б.А.Гришанин, К.Н. Драбович, В.А. Макаров, Задачи по курсу "Статистическая физика", Москва: МГУ, 10 с., 1993.

10. Участие в зарубежных командировках

- *Б.А.Гришанин*
 - Institute for Theoretical Physics, Helsinki, Finland, May 1993, выступление на семинаре с докладом
 - VIII Int. Symp. on Ultrafast Processes in Spectroscopy, Vilnius, Lithuania, October 1993, выступление с приглашенным докладом

- *В.Н.Задков*
 - Quantum Electronics and Laser Science Conference, Washington, USA, May 1993, выступление с докладом
 - 2nd Int. Conf. on Lasers in Chemistry, Trieste, Italy, November 1993, выступление с докладом
 - Int. Conf. on Education and Training in Optics, Budapest, Hungary, August 1993, был ведущим круглого стола на конференции
- *В.Л.Рыжков*
 - Летняя студенческая школа, Юваскила, Финляндия, Август 1993, участник

11. Участие в хоздоговорных работах

нет

12. Курсы лекций в сторонних организациях

3 лекции во время зарубежной командировки в США в мае 1993 г.

13. Гранты, etc.

IV раздел программы Университеты России (Орг.-учебная деятельность МЛЦ МГУ). Получено около 5 млн руб. Освоено около 5 млн руб.

Руководитель научной группы

к.ф.-м.н., доцент

В.Н.Задков