

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЛАБОРАТОРИЯ

Научный отчет за 1994 г.

1. Наиболее значимые результаты за 1994 г.

Общей целью работы в 1994 г. было развитие новых методов компьютерного моделирования фотостимулированных процессов в многоатомных молекулах. Суть подхода состоит в использовании адекватной комбинации точных квантовомеханических методов для описания электронных переходов и квазиклассических уравнений для описания движения ядер. Основным объектом приложения разработанных методов были фотостимулированные реакции в молекуле стильбена, включая конформационные *trans-cis* и *cis-trans* переходы, а также образование дигидрофенантрена (ДНР). Показано, что в рамках данного подхода получают адекватное объяснение все основные полученные экспериментально количественные характеристики указанных реакций. Эти результаты открывают возможности для практического управления ходом фотостимулированных реакций на основе разработанной эффективной методики компьютерного моделирования.

Разработана и практически опробована новая методика расчета молекулярной динамики в сверхсильных лазерных полях, позволяющая использовать классические уравнения для описания движения ядер в поле молекулярного потенциала, модифицированного лазерным полем.

Выполнена работа по анализу феноменологической квантовомеханической стохастической модели динамики молекулы в растворителе, основанной на гауссовском описании молекулярных термов и флуктуационных сил, обусловленных растворителем. Анализ модели позволил выявить ряд физических эффектов, не поддающихся описанию в рамках других известных моделей.

Начата работа по исследованию нового метода построения редуцированных моделей молекулярной динамики многоатомных молекул, основанного на полученных ранее данных о параметрах потенциалов Молекулярной Механики, выраженных в виде функций полного набора всех ядерных координат. Построение эффективных редуцированных моделей открывает новые возможности применения компьютерного моделирования в физическом эксперименте, а также возможность применения более точных, квантовомеханических, уравнений для описания динамики ядер.

2. Открытия, премии, etc.

нет

3. Список работ

1. B.A.Grishanin, A.Yu.Chikishev, N.I.Koroteev, V.N.Zadkov, V.D.Vachev, "Fast pico- and femtosecond reaction dynamics in the excited states of large molecules: Fluorescence studies and computer simulations", In: *Femtosecond Reaction Dynamics*, Ed. D.A.Wiersma (Amsterdam-Oxford-N.Y.-Tokyo: North-Holland, 1994), pp. 169–195.
2. Б.А.Гришанин, В.Н.Задков, В.Л.Рыжков, "Релаксация двухуровневого атома в поле интенсивного квазимонохроматического лазерного излучения", Вестник Московского Университета. Серия 3. Физика, астрономия. Т. 35. No. 3, С. 23–28.
3. V.D.Vachev, J.H.Frederick, B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, N.I.Koroteev, "Multidimensional effects in stilbine photoinduced intramolecular dynamics: Spectra and MD calcu-

lations”, In: 5th european Quantum electronics Conference Technical Digest (Amsterdam: 1994) pp. 87–88.

4. B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, “Computer modeling of HCl+ dissociation dynamics in intense IR laser field”, In: International Quantum electronics Conference, Vol. 9, 1994 OSA Technical digest Series (Optical Society of America, Washington, D.C., 1994), pp. 50–51.
5. B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, “Quantum jumps in molecules excited by intense laser field”, Technical Digest of II Int. Workshop on Quantum Communications and Measurements, Nottingham: 1994, p. 37.
6. B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, “Quantum jumps in molecules excited by intense laser field”, In: Proceedings of the Workshop on Quantum Communications and Measurements (in press).
7. B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, “Computer simulation of femtosecond molecular dynamics: How to combine classical and quantum approaches?”, In: Digest of the LALS’94 International conference, Minsk: 1994, p. 68.
8. B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, “Computer simulation of femtosecond molecular dynamics: How to combine classical and quantum approaches?”, Laser Applications in Life Sciences, SPIE Proc. Vol. 2370, Eds. P.A.Apanasevich, N.I.Koroteev, S.G.Kruglik, V.N.Zadkov, pp. 414–425 (1994).
9. V.D.Vachev, J.H.Frederick, B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, N.I.Koroteev, “Quasiclassical molecular dynamics simulation of the photoisomerization of stilbene”, submitted to the J. Phys. Chem.

4. Защиты диссертаций

Нет

5. Участие студентов в конференциях/печатные работы

В.Л.РЫЖКОВ (см. [2] в списке работ)

6. Выставки, награды

нет

7. Конференции и т.п.

1. V.D.Vachev, J.H.Frederick, B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, N.I.Koroteev, “Multidimensional effects in stilbine photoinduced intramolecular dynamics: Spectra and MD calculations”, In: 5th european Quantum electronics Conference Technical Digest (Amsterdam: 1994) pp. 87–88.
2. B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, “Computer modeling of HCl+ dissociation dynamics in intense IR laser field”, In: International Quantum electronics Conference, Vol. 9, 1994 OSA Technical digest Series (Optical Society of America, Washington, D.C., 1994), pp. 50–51.
3. B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, “Quantum jumps in molecules excited by intense laser field”, Technical Digest of II Int. Workshop on Quantum Communications and Measurements, Nottingham: 1994, p. 37.
4. B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, “Computer simulation of femtosecond molecular dynamics: How to combine classical and quantum approaches?”, In: Digest of the LALS’94 International conference, Minsk: 1994, p. 68.

5. B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, "Molecular photodissociation dynamics", Kassel: German-Russian Symp. on Laser Physics, 1994.
6. B.A.Grishanin, V.N.Zadkov, "An insight into the nature of quantum stochastic processes by use of computer: quantum jumps in molecules excited by intense laser field", Winter college on quantum optics, Trieste: Italy, 1994.

8. Учебные пособия, книги и т.п.

Laser Applications in Life Sciences, SPIE Proc. Vol. 2370, Eds. P.A.Apanasevich, N.I.Korootev, S.G.Kruglik, and V.N.Zadkov

9. Участие в зарубежных командировках

Б.А.Гришанин

1. Winter college on Quntum Optics, Trieste, Italy, 1994, выступление с докладом
2. II Int. Workshop on Quantum Communications and Measurements, Nottingham, UK, 1994, выступление с докладом
3. University of rostok, Germany, выступление с докладом на семинаре, визит по плану договора о сотрудничестве между МГУ и University of Rostok

В.Н.Задков

1. European Quantum Electronics and Laser Science Conference, Amsterdam, the Netherlands, 1994, выступление с докладом
2. IQEC'94, Anaheim, USA, выступление с докладом/проведение семинара в University of Nevada, Reno.
3. Russian-German Symp. on Laser Physics, Kassel, FRG, 1994, выступление с докладом

В.Л.Рыжков

1. Студенческий обмен между МГУ и University of Wiscontin, USA, 1994.

11. Участие в хоздоговорных работах, Гранты, etc.

1. IV раздел программы Университеты России (Орг.-учебная деятельность МЛЦ МГУ). Получено около 8 млн руб. Освоено около 8 млн руб. via ILC MSU
2. Целевой грант РФФИ на проведение ILC LGS'94 (4 млн руб) via ILC MSU
3. ISF grant #MS9000 (10K USD) via ILC MSU
4. NATO Linkage grant (together with Univ. of Nevada, Reno) (10K USD/year)

Руководитель научной группы
к.ф.-м.н., доцент

В.Н.Задков