

Моделирование фемтосекундной внутримолекулярной динамики высоковозбужденных молекул йода

Дозморов Н. В.

Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского СО РАН
Новосибирский государственный университет

Для изучения динамики внутримолекулярных процессов с фемтосекундным временным разрешением широко используется подход «накачка-зондирование» (pump-probe). В совместных экспериментах ИХКГ СО РАН и Фрайбургского университета, этот метод использовался для изучения динамики молекул I_2 при их фотовозбуждении в состоянии ионной пары. При этом для зондирования состояния волнового пакета использовалось измерение «мгновенного» распределения по кинетической энергии относительного движения ионов I^+ и I^- в состоянии ионной пары с использованием техники измерения карт скоростей (velocity map imaging) фотофрагментов.

Данная работа посвящена моделированию фемтосекундной внутримолекулярной динамики высоковозбужденных молекул I_2 . В рамках нее проведено рассмотрение динамики с точки зрения классической и квантовой механики. Основные цели моделирования – описать динамику внутримолекулярных процессов и получить распределение по кинетической энергии относительного движения ионов в возбуждаемых состояниях ионной пары как функцию времени, что позволит сравнивать эти данные с экспериментально полученными. Все численные расчеты проведены с помощью системы Wolfram Mathematica.

При классическом описании движения система была рассмотрена в виде точечной частицы, находящейся в потенциале, соответствующем изучаемому состоянию ионной пары. Описывая движение частицы с помощью классических законов, была получена зависимость распределения по кинетической энергии от времени, которая сравнивалась с экспериментальными данными [1].

Для квантовомеханического описания системы было проведено моделирование движения волнового пакета при возбуждении молекулы из основного состояния в состояние ионной пары. Распространение волнового пакета рассчитывалось с помощью метода расщепления экспоненциального оператора (exponential split operator method).

[1] von Vangerow J. et al. Role of ion-pair states in the predissociation dynamics of Rydberg states of molecular iodine //Physical Chemistry Chemical Physics. – 2016. – Т. 18. – №. 28. – С. 18896-18904.