

УДК: 517.958

## Численное исследование фотовозбужденных поляронных состояний в воде

А. В. Волохова<sup>1,a</sup>, Е. В. Земляная<sup>1</sup>, В. Д. Лахно<sup>2</sup>, И. В. Амирханов<sup>1</sup>,  
И. В. Пузынин<sup>1</sup>, Т. П. Пузынина<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Лаборатория информационных технологий, Объединенный институт ядерных исследований,  
Россия, 141980, Московская область, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, д. 6

<sup>2</sup>Институт математических проблем биологии Российской академии наук,  
Россия, 142290, Московская область, г. Пущино, ул. Институтская, д. 4

E-mail: <sup>a</sup> volokhova@jinr.ru

Получено 25 марта 2014 г.,  
после доработки 7 апреля 2014 г.

Разработан метод и комплекс программ для численного моделирования процесса формирования поляронных состояний в конденсированных средах. Проведено численное исследование этого процесса для водной среды при воздействии лазерного облучения в ультрафиолетовом диапазоне. Показано, что в рамках предложенного подхода удается численно воспроизвести экспериментальные данные по формированию гидратированных электронов. Представлена схема численного решения системы нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, описывающих динамическую модель полярона. Программная реализация выполнена с использованием технологии параллельного программирования MPI. Обсуждаются численные результаты в сравнении с экспериментальными данными и теоретическими оценками.

Ключевые слова: поляронное состояние, гидратированный (сольватированный) электрон, конечно-разностные схемы, параллельная реализация

## Numerical investigation of photoexcited polaron states in water

A. V. Volokhova<sup>1</sup>, E. V. Zemlyanaya<sup>1</sup>, V. D. Lakhno<sup>2</sup>, I. V. Amirkhanov<sup>1</sup>,  
I. V. Puzynin<sup>1</sup>, T. P. Puzynina<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratory of information technologies, Joint Institute for Nuclear Research, 6 Joliot-Curie st., Dubna,  
Moscow Region, 141980, Russia

<sup>2</sup>Institute of Mathematical Problems of Biology, Russian Academy of Sciences, 4 Institutskaya st., Pushchino,  
Moscow Region, 142290, Russia

**Abstract.** — A method and a complex of computer programs are developed for the numerical simulation of the polaron states excitation process in condensed media. A numerical study of the polaron states formation in water under the action of the ultraviolet range laser irradiation is carried out. Our approach allows to reproduce the experimental data of the hydrated electrons formation. A numerical scheme is presented for the solution of the respective system of nonlinear partial differential equations. Parallel implementation is based on the MPI technique. The numerical results are given in comparison with the experimental data and theoretical estimations.

Keywords: polaron state, hydrated (solvated) electron, finite difference approximation, parallel implementation

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2014, vol. 6, no. 2, pp. 253–261 (Russian).

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (гранты 12-01-00396, 13-01-00595, 13-07-00256)

## Введение

В результате радиолиза жидких и стеклообразных систем, как правило, возникают связанные (сольватированные) состояния электронов, в которых электрон не образует химических связей [Харт и др., 1970; Пикаев, 1970; Феррадини и др., 1990]. Такие состояния можно представить себе как захват избыточного электрона поляризационной потенциальной ямой, образованной индуцированной им поляризацией окружающих его молекул среды. Таким образом, под действием облучения вода переходит в особое состояние, характеризующееся специальными физическими и химическими свойствами.

Изучение этих свойств имеет огромное теоретическое и прикладное значение. Интерес к изучению сольватированного электрона связан, прежде всего, с тем, что с его участием происходит огромное число реакций, изучаемых как в неорганической, так и в органической химии. Особый интерес представляет гидратированный электрон, являющийся в воде самым сильным восстановителем. В биологических системах гидратированный электрон играет большую роль в процессах переноса заряда на большое расстояние. Поэтому, изучение динамики полярона представляет несомненный интерес для понимания механизмов переноса заряда и энергии в различных физических, химических и биологических системах [Лахно, 2007].

Важную информацию о структуре гидратированного электрона и кинетике химических реакций с его участием дает динамика спектров поглощения при его образовании в облученной воде. Современные фемтосекундные спектроскопические методы дают детальную информацию о динамике образования гидратированных электронов, возбуждаемых в чистой воде посредством ее фотооблучения. Целью наших исследований является разработка метода расчета, который бы адекватно описывал такую динамику.

В настоящей работе представлены результаты численного моделирования процесса формирования состояний гидратированного электрона в воде в рамках динамической модели полярона. Работа построена следующим образом. В разделе 1 представлена математическая постановка задачи. В разделе 2 описан численный подход и даны результаты методических расчетов, сделанных для проверки корректности модели и эффективности параллельной компьютерной реализации. В разделе 3 представлены результаты численного моделирования. В заключении изложены основные выводы.

## 1. Математическая постановка задачи

Как и в [Давыдов, Энольский, 1981], нами использован подход, основанный на трансляционно-инвариантной теории полярона Ландау–Пекара [Пекар, 1951]. На основе функционала полной энергии оптического полярона Пекара в работе [Лахно, 2007] сформулированы соответствующие уравнения движения, описывающие динамику волновой функции полярона  $\Psi$  и потенциала поляризации  $\Phi$  с учетом релаксации, определяемой коэффициентом трения  $\gamma$ . Эти уравнения имеют вид:

$$i\hbar\dot{\Psi}(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2\bar{m}}\Delta\Psi(\vec{r}, t) - e\Phi(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t), \quad (1)$$

$$\frac{1}{4\pi\omega^2 c}\Delta\ddot{\Phi}(\vec{r}, t) + \gamma\Delta\dot{\Phi}(\vec{r}, t) + \frac{1}{4\pi c}\Delta\Phi(\vec{r}, t) + e|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = 0. \quad (2)$$

Здесь  $\hbar$  — постоянная Планка,  $\bar{m}$  — эффективная масса электрона,  $c = \varepsilon_\infty^{-1} - \varepsilon_0^{-1}$ ,  $\varepsilon_\infty$  и  $\varepsilon_0$  — высокочастотная и статическая диэлектрические постоянные,  $e$  — заряд электрона,  $\omega$  — частота оптических поляризационных колебаний среды. Полагая

$$\Delta\Phi(\vec{r}, t) = \theta(\vec{r}, t), \quad (3)$$

где  $\theta$  имеет физический смысл плотности распределения поляризационного заряда, индуцированного электроном, уравнение (2) можно преобразовать к виду

$$\frac{1}{4\pi\omega^2c} \ddot{\theta}(\vec{r}, t) + \gamma\Delta\dot{\theta} + \frac{1}{4\pi c} \theta(\vec{r}, t) + e|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = 0. \quad (4)$$

Далее, используя разложение решений уравнений (1),(3),(4) по сферическим функциям, мы получаем систему пространственно одномерных нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, описывающих эволюцию заданного в начальный момент времени поляронного состояния в сферически симметричном приближении:

$$\begin{cases} \left[ i2\tilde{m} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2\tilde{m} \frac{r_{00}}{\tilde{\epsilon}} \frac{\phi(x, t)}{x} \right] \psi(x, t) = 0, \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x, t) = \Theta(x, t), \\ \left[ \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \tilde{\gamma} \frac{\partial}{\partial t} + \tilde{\omega}^2 \right] \Theta(x, t) = -\omega^2 \frac{|\psi(x, t)|^2}{x}. \end{cases} \quad (5)$$

Граничные условия имеют вид

$$\phi(0, t) = \phi'(\infty, t) = 0, \quad \psi(0, t) = \psi(\infty, t) = 0, \quad \Theta(0, t) = \Theta(\infty, t) = 0. \quad (6)$$

Здесь  $\psi(x, t)$  — безразмерная радиальная составляющая волновой функции электрона  $\Psi$ ,  $\phi(x, t)$  — безразмерная радиальная часть потенциала поляризации, индуцируемого электроном  $\Phi$ , безразмерная функция  $\Theta(x, t)$  имеет физический смысл радиальной части плотности распределения поляризационного заряда  $\theta$ ,  $\tilde{\epsilon} = 1.81$  — коэффициент диэлектрической проницаемости,  $\tilde{m} = 2.692$ ,  $\tilde{\gamma} = 2.145$ ,  $\tilde{\omega} = 1$  — безразмерные параметры эффективной массы гидратированного электрона, релаксации (трения) и частоты. Масштабирующий множитель  $r_{00} = \sqrt{t_0/t_{A0}} = 164.64$  введен, чтобы «уравновесить» отличающиеся более чем на 10 порядков исходные значения физических параметров (здесь  $t_0 = 1/\omega_0$ ,  $\omega_0 = 1.5246 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$  — характерная частота колебаний среды,  $t_{A0} = 2.42 \cdot 10^{-17} \text{ с}$  — атомная единица времени).

Переход от безразмерных переменных  $t$  и  $x$  из системы (5) к размерным значениям  $t_{size}$  и  $r$  осуществляется по формулам  $t_{size} = t \cdot t_0$ ,  $r = x \cdot r_0$ , где  $r_0 = r_{00} \cdot a$ ,  $a = 0.529 \cdot 10^{-8} \text{ см}$  — борковский радиус. Отметим, что при перемасштабировании существенно (по закону  $x = r/r_{00}$ ) уменьшается интервал интегрирования по пространственной переменной, что облегчает компьютерное моделирование.

Связь эффективной массы гидратированного электрона  $\tilde{m}$ , частоты оптических поляризационных колебаний среды  $\omega$  и коэффициента трения  $\gamma$  из уравнений (1),(3),(4) с безразмерными параметрами  $\tilde{m}$ ,  $\tilde{\omega}$ ,  $\tilde{\gamma}$  из системы (5) определяется соотношениями  $\tilde{m} = \tilde{m} \cdot m_e$  (где  $m_e$  — масса электрона в вакууме),  $\omega = \tilde{\omega}/t_0$ ,  $\gamma = \tilde{\gamma}/t_0$ .

## 2. Метод численного исследования

### 2.1. Вычислительная схема

Для численного решения система дифференциальных уравнений (5) заменяется системой разностных уравнений на равномерной дискретной сетке с узлами  $x_m = m \times h_x$  и  $t_n = n \times h_t$ , где  $h_x$  и  $h_t$  — шаги по пространственной и временной переменным. В результате подстановок известных конечно-разностных формул [Березин, Жидков, 1959] мы получаем систему сеточных

уравнений относительно значений функций  $\psi_m^n = \psi(x_m, t_n)$ ,  $\phi_m^n = \phi(x_m, t_n)$ ,  $\Theta_m^n = \Theta(x_m, t_n)$  в узлах дискретной сетки:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\psi_m^{n+1} - \psi_m^n}{h_t} = i \left\{ \bar{\sigma} \left[ \frac{\psi_{m+1}^{n+1} - 2\psi_m^{n+1} + \psi_{m-1}^{n+1}}{2\tilde{m}h_x^2} + \frac{r_{00}}{\tilde{\epsilon}} \frac{\varphi_m^{n+1}}{\tilde{m}h_x} \psi_m^{n+1} \right] + \right. \\ \left. + (1 - \bar{\sigma}) \left[ \frac{\psi_{m+1}^n - 2\psi_m^n + \psi_{m-1}^n}{2\tilde{m}h_x^2} + \frac{r_{00}}{\tilde{\epsilon}} \frac{\varphi_m^n}{\tilde{m}h_x} \psi_m^n \right] \right\}, \\ \frac{\varphi_{m+1}^{n+1} - 2\varphi_m^{n+1} + \varphi_{m-1}^{n+1}}{h_x^2} = \Theta_m^{n+1} \\ \frac{\Theta_m^{n+1} - 2\Theta_m^n + \Theta_m^{n-1}}{h_t^2} + \gamma \frac{\Theta_m^{n+1} - \Theta_m^n}{h_t} + \omega^2 \Theta_m^{n+1} = -\omega^2 \frac{|\psi_m^n|^2}{\tilde{m}h_x}, \\ \bar{\sigma} = 0.5, \quad \Theta_m^{-1} = -\frac{|\psi_m^0|^2}{\tilde{m}h_x}; \quad \Theta_m^0 = \Theta_m^{-1}; \\ \varphi_0^n = 0; \quad \varphi_L^n = \varphi_{L-1}^n; \quad m = 1, 2, \dots, L; \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{array} \right. \quad (7)$$

Для численного решения системы (7) использована предложенная и апробированная в [Амирханов и др., 2011] схема, построенная так, чтобы обеспечить возможность на каждом  $n$ -м временном слое последовательно вычислять значения  $\Theta_m^{n+1}$ ,  $\varphi_m^{n+1}$  и  $\psi_m^{n+1}$ , избегая тем самым необходимости численного решения для каждого  $n$  системы трех нелинейных уравнений. На каждом слое с номером  $n$  выполняется следующая последовательность действий:

1. Из третьего уравнения при известных  $\psi_m^n$  вычисляем  $\Theta_m^{n+1}$ .
2. Найденные  $\Theta_m^{n+1}$  подставляются во второе уравнение, которое решается методом прогонки для вычисления  $\varphi_m^{n+1}$ .
3. Полученные  $\varphi_m^{n+1}$  подставляются в первое уравнение, которое решается методом прогонки относительно  $\psi_m^{n+1}$ .
4. Переход к п.1 для следующего значения  $n$ .

## 2.2. Параллельная реализация

Для ускорения вычислений была проведена оптимизация вышеописанной схемы путем использования в ее пунктах 2 и 3 алгоритма встречных прогонок, который хотя требует несколько большего количества арифметических операций, легко распараллеливается на два процесса и не требует больших затрат на их взаимодействие. Параллельная реализация оптимизированного алгоритма выполнена на основе технологии MPI.

Для сравнения исходной последовательной программы и ее двухпроцессорной модификации были проведены сравнительные тестовые расчеты с вариацией количества шагов  $N_t$  и  $L$  соответственно по временной ( $t$ ) и пространственной ( $x$ ) координатам. Результаты этих методических вычислений на многопроцессорном кластере LXPUB ЛИТ ОИЯИ представлены в таблице 1 и на рисунке 1. Видно, что при  $L \geq 5000$  ускорение  $T_1/T_2$  (где  $T_1$  — время счета с использованием исходной последовательной программы,  $T_2$  — время работы двухпроцессорной модификации) достигает  $1.79 \div 1.84$  (см. рис. 1). Эффективность загрузки процессоров (отношение ускорения к числу узлов) при этом составляет  $\approx 90\%$ .

Таким образом, применение технологии параллельного программирования позволяет ускорить вычислительный процесс почти в два раза, что особенно актуально при вычислениях на длинных временных интервалах, требующих  $\approx 10^7$  шагов по  $t$ .

Отметим здесь, что распределение вычислений на большее число MPI-процессов представляется малоэффективным, если оставаться в рамках используемой нами вычислительной

Таблица 1. Время счета (в секундах) при использовании последовательной программы и двух-процессорной параллельной модификации в зависимости от числа шагов по пространственной и временной переменной

программная реализация	$N_t$	$L=1000$	$L=5000$	$L=10000$	$L=15000$	$L=20000$
последовательная	100000	30.2	109.3	221.2	327.3	433.4
последовательная	200000	49.1	219	443.5	655.7	874.9
параллельная	100000	21.5	60.9	123.6	180.2	237.9
параллельная	200000	43.4	121.5	247.3	365.6	475.3
ускорение	100000	1.40	1.79	1.79	1.82	1.82
ускорение	200000	1.13	1.80	1.79	1.79	1.84

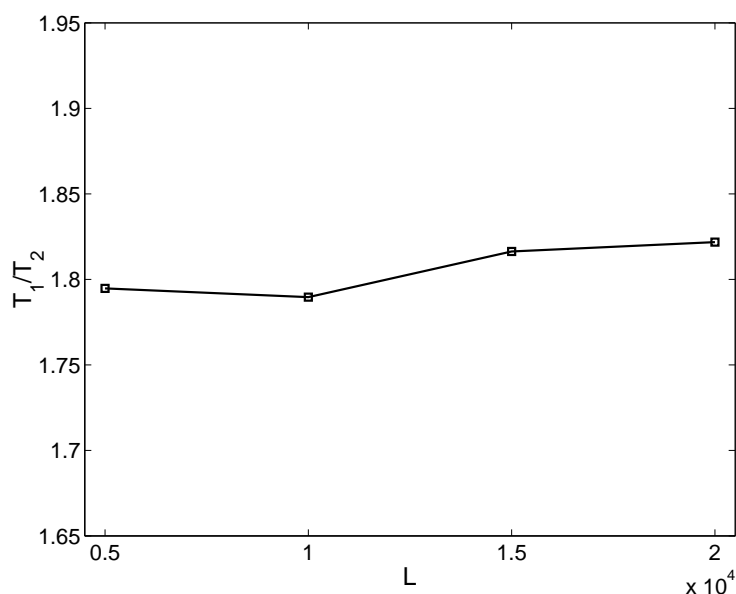


Рис. 1. Ускорение вычислений при использовании двух-процессорной модификации по сравнению с исходной однопроцессорной программой.  $T_1$  — время счета с использованием исходной последовательной программы,  $T_2$  — время работы двух-процессорной модификации

схемы. В самом деле, известной параллельной альтернативой классическому методу прогонки для решения трехдиагональных алгебраических систем является метод разбиений (см., например, [Ванг, 1981]). Однако расчеты [Айрян и др., 2005] показывают, что этот алгоритм эффективен при размерности системы более 50000, в то время как в нашем случае размерность системы не превышает  $5000 \div 20000$ . Поэтому мы предполагаем, что применение метода разбиений не даст значительного эффекта. Естественно, данное предположение требует численной проверки, что является предметом дальнейших исследований.

### 2.3. Стационарные решения

Система (5) имеет стационарные, т. е. не зависящие от времени решения, удовлетворяющие задаче на собственные значения для системы обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \left[ \frac{d^2}{dx^2} - 2\tilde{m}\lambda + 2\tilde{m} \frac{r_{00}}{\tilde{\epsilon}} \frac{\Phi(x)}{x} \right] \Psi(x) = 0, \\ \frac{d^2}{dx^2} \Phi(x) = -\frac{\Psi^2(x)}{x}, \quad 0 \leq x \leq \infty, \end{cases} \quad (8)$$

с граничными условиями и с условием нормировки

$$\begin{cases} \Psi(0) = 0, & \Phi(0) = 0, \\ \Psi(\infty) = 0, & \Phi'(\infty) = 0, \end{cases} \quad \int_0^{\infty} \Psi^2(x) dx = 1. \quad (9)$$

Можно показать, что при использовании начальных условий для системы (5) в виде:

$$\begin{aligned} \psi(x, t)|_{t=0} &= \Psi_k(\cos(\lambda_k \xi) + i \sin(\lambda_k \xi)), \\ \Theta(x, t)|_{t=0} &= -\frac{\Psi_k^2}{x}, \quad \frac{\partial}{\partial t} \Theta(x, t) \Big|_{t=0} = 0, \end{aligned} \quad (10)$$

где  $\xi$  может иметь произвольное значение (мы полагали в расчетах  $\xi = \pi/4$ ),  $\Psi_k, \lambda_k$  — собственная функция задачи (8) с числом узлов  $k$  и соответствующее собственное значение, интеграл энергии, рассчитываемый по формуле

$$W(t) = \frac{1}{2\tilde{m}} \int \left| \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right|^2 dx - \frac{r_{00}}{\tilde{\epsilon}} \int \frac{\varphi(x, t) |\psi(x, t)|^2}{x} dx, \quad (11)$$

не зависит от времени, т. е. является константой, совпадающей в абсолютном значении с  $\lambda_k$ .

Поэтому для проверки корректности вычислительной схемы были вычислены на основе непрерывного аналога метода Ньютона [Пузынин и др., 1999] три решения задачи (8) с числом узлов  $k = 0, 1, 2$ . Соответствующие собственные значения получились равными

$$\lambda_0 = 3625.55; \quad \lambda_1 = 685.97; \quad \lambda_2 = 279.01.$$

С использованием этих решений построены начальные условия (10) и проведены тестовые расчеты, в результате которых было установлено, что при выборе  $h_x = 5 \cdot 10^{-5}$  и  $h_t \cdot 10^{-7}$  интеграл энергии  $W(t)$  и формы кривых решений системы (5) не изменяются в течение физически значимого промежутка времени. Это подтверждает корректность вычислительной схемы и C++/MPI реализации.

#### 2.4. Сравнение с теоретической оценкой энергии

Согласно теоретическим оценкам [Лахно, 2007], значение интеграла энергии, соответствующее основному стационарному состоянию полярона  $k = 0$ , равно

$$W_0(\infty) = -0.163 \frac{m^* e^4}{\hbar^2} c^2, \quad (12)$$

где  $e$  — заряд электрона,  $c = 0.552$  — разность между высокочастотной и статической диэлектрическими постоянными,  $m^* = 2.692 \cdot m_0$  — эффективная масса электрона в среде,  $m_0$  — масса электрона в вакууме. Учитывая, что полная энергия  $E = e^2/a = 27.2$  эВ, где  $a = \hbar^2/(m_0 \cdot e^2)$  — боровский радиус, теоретическая оценка дает  $W_0 = -3.637$  эВ. Согласно нашим расчетам при переходе к размерным величинам получаем  $W_0 = (W_0^{numerical}/r_{00}) \times E = -3.638$  эВ. Следовательно, рассчитанные в рамках нашей модели значения  $W(\infty)$  вполне согласуются с теорией.

### 3. Результаты численного моделирования

В работе [Лонг и др., 1990] представлены экспериментальные данные по временной зависимости поглощения света поляризованной водой. Выражение для расчета поглощения в рамках динамической модели полярона имеет вид [Лахно, 2007]

$$I(\Omega, t) = \frac{4\Omega^2 \gamma_s^2}{(W(t)^2 - \Omega^2)^2 + 4\Omega^2 \gamma_s^2}, \quad (13)$$

где  $\gamma_s = 0.38$  эВ — ширина полосы поглощения гидратированного электрона, а  $\Omega$  имеет физический смысл частоты света сканирующего лазера, на которой происходит поглощение света гидратированным электроном.

Для воспроизведения упомянутых экспериментальных данных начальные значения волновой функции  $\psi$  выбирались в гауссовской форме. Начальное условие для функции  $\Theta$  аналогично (10). Начальное условие для функции  $\phi$  не требуется в рамках нашей вычислительной схемы. Фактически начальное значение  $\phi$  является решением второго уравнения системы (5) с  $\psi(x, 0)$  в правой части.

С учетом сферической симметрии, перемасштабирования и нормировки функция  $\psi$  в момент времени  $t = 0$  рассчитывалась следующим образом:

$$\psi(x, 0) = F_g(\tilde{x}) \times \sqrt{4\pi} \times \tilde{x} \times \sqrt{r_{00}}, \quad \tilde{x} = x \times r_{00}, \quad (14)$$

где

$$F_g(x) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{3/4} \frac{1}{\sigma^{3/2}} \exp(-x^2/\sigma^2). \quad (15)$$

Параметр  $\sigma$  в показателе экспоненты, определяющий характерный размер волновой функции в начальный момент времени, выбирался так, чтобы при компьютерном моделировании воспроизвести динамику  $I(t)$  из [Лонг и др., 1990]. Расчеты проводились для  $\Omega = 1.984$  эВ и  $\Omega = 1.512$  эВ.

В работе [Волохова и др., 2014] показано, что экспериментально наблюдаемая динамика  $I(t)$  может в принципе адекватно воспроизводиться при достаточно малых значениях параметра  $\sigma$ , а именно при  $\sigma = 0.7955$  для  $\Omega = 1.984$  эВ и при  $\sigma = 0.9$  для  $\Omega = 1.512$  эВ. Однако при этом мы получаем значения радиуса волновой функции в начальный момент времени, существенно отличающиеся от известных оценок  $2 \div 3 \cdot 10^{-8}$  см (см., например, [Харт и др., 1970]). Динамика изменения характерного размера (радиуса) волновой функции в терминах системы (5) в размерных величинах (сантиметрах) определяется формулой

$$R(t) = r_0 \int |\psi|^2 r dr. \quad (16)$$

Наши вычислительные эксперименты показали, что близкие к указанным оценкам значения  $R(t)$  обеспечиваются при  $4.5 < \sigma < 6.5$ .

На рис. 2 и 3 для случаев  $\Omega = 1.984$  эВ и  $\Omega = 1.512$  эВ показаны результаты совмещения экспериментальных данных из [Лонг и др., 1990], приближенных теоретических оценок из [Лакно, 2007] и полученных нами расчетных кривых с  $\sigma = 5$  и  $\sigma = 5.75$ . Расчетные данные представлены сплошной кривой, теоретические оценки — штриховой, а экспериментальные — зубчатой. Видно, что рассмотренная в настоящей работе модель в целом обеспечивает согласие как с экспериментальными, так и с теоретическими оценками. Расхождение численных и теоретических оценок с экспериментальными данными на начальном участке графика мы объясняем тем, что в формуле (13) не учитывается зависимость величины  $\gamma_s$  от времени. Уточнение метода расчета  $I(\Omega, t)$  является предметом дальнейших исследований.

Вычисления показывают, что значение радиуса в представленных на рисунках 1 и 2 случаях падает с ростом  $t$ , что соответствует современным представлениям о физике процесса формирования гидратированного электрона. При этом как начальное значение радиуса  $2.4 \div 2.6 \cdot 10^{-8}$  см, так и конечное  $1.5 \div 1.7 \cdot 10^{-8}$  см близки к уже упомянутой оценке  $2 \div 3 \cdot 10^{-8}$  см. Таким образом, можно заключить, что разработанный подход позволяет адекватно воспроизводить динамику изменения поглощения света гидратированным электроном.

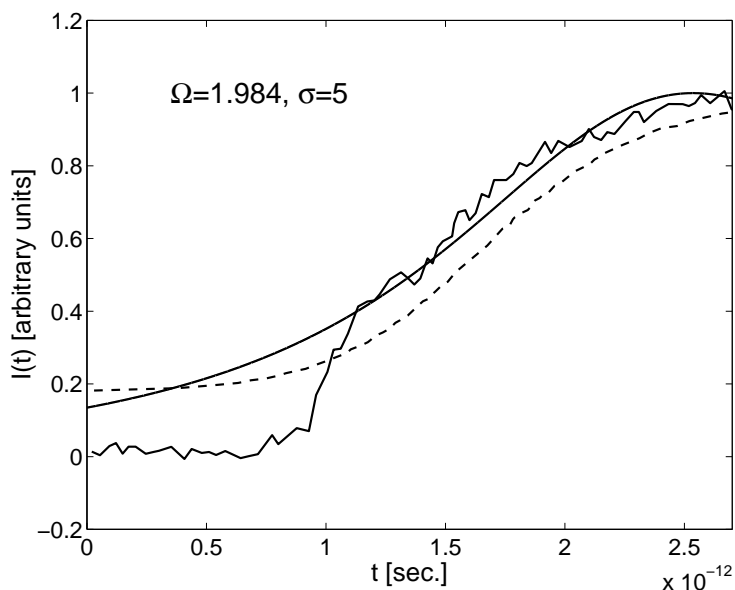


Рис. 2. Эволюция поглощения света гидратированным электроном при  $\Omega = 1.984$  эВ. Зубчатая кривая — эксперимент [Лонг и др., 1990], сплошная гладкая кривая — наш расчет, штриховая кривая — приближенная теоретическая оценка [Ляхно, 2007]

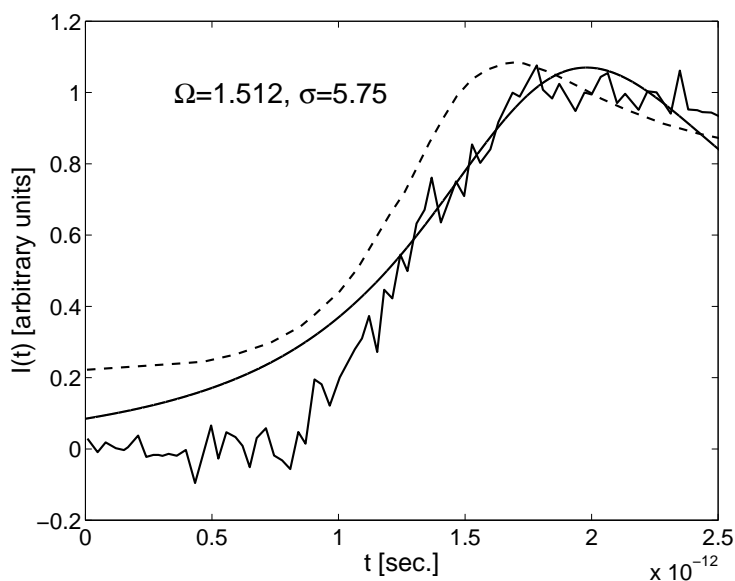


Рис. 3. То же, что на рис. 1, но для  $\Omega = 1.512$  эВ

## Заключение

Разработана и программно реализована динамическая модель формирования состояний гидратированного электрона. Корректность работы соответствующей MPI/C++ программы подтверждена путем сравнения результатов расчета с теоретической оценкой значения интеграла энергии и на основе моделирования с начальными условиями в виде решений стационарной задачи.

Показано, что в рамках рассмотренного подхода удастся адекватно воспроизвести результаты эксперимента по формированию фотовозбужденных электронов в воде под действием ла-



зерного облучения в ультрафиолетовом диапазоне. Таким образом, модель может быть использована для дальнейших расчетов и прогнозов при изучении динамики поляронных состояний как в водной среде, так и в иных конденсированных средах.

## Список литературы

- Айрян Э. А., Буша Я., Донец Е. Е., Покорны И., Стрельцова О. И. Численное исследование распада возмущенных стационарных решений системы уравнений Янга–Миллса с дилатоном с использованием технологии MPI // Матем. моделирование. — 2005. — 17:6. — С. 103–121.
- Амирханов И. В., Земляная Е. В., Лахно В. Д. Математическое моделирование эволюции поляронных состояний // Поверхность: рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2011. — № 1. — С. 66–70.
- Березин И. С., Жидков Н. П. Методы вычислений. Т. 1. — М.: «Наука», 1959. — 632 с.
- Волохова А. В., Земляная Е. В., Лахно В. Д., Амирханов И. В., Пузынин И. В., Пузынина Т. П. Компьютерное моделирование формирования состояний гидратированного электрона // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия «Математика. Информатика. Физика». — 2014. — № 2. — С. 244–247.
- Давыдов А. С., Энольский В. З. Трехмерный солитон в ионном кристалле // ЖЭТФ. — 1981. — Т. 81, Вып. 3(9). — С. 1088–1098.
- Пекар С. И. Исследования по электронной теории кристаллов. — М.: «Гостехиздат», 1951. — 256 с.
- Пузынин И. В. и др. Обобщенный непрерывный аналог метода Ньютона для численного исследования некоторых нелинейных квантово-полевых моделей // ЭЧАЯ. — 1999. — Т. 30, Вып. 1. — С. 210–265.
- Ferradini C., Jay-Gerin J. P. Excess electrons in dielectric media. — CRC Press, Boca Rato, 1990. — 368 p.
- Hart E. H., Anbar M., Wiley N. Y. The Hydrated Electron. — 1970. — 187 с.
- Lakhno V. D. Dynamical polaron theory of the hydrated electron // Chem. Phys. Lett. — 2007. — V. 437. — P. 198–202.
- Long F. H., Hong L., Kenneth B. E. Femtosecond Studies of the Presolvated Electron: An Excited State of the Solvated Electron // Physical Review Letters. — 1990. — V. 64, No. 12. — P. 1469–1472.
- Pikaev A. K. The solvated electron in radiation Chemistry. — World University, Jerusalem, 1970.
- Wang H. H. A Parallel Method for Tridiagonal Equations // ACM Trans. Math. Software. — 1981. — 7. — P. 170–183.