

УДК 517.958:57

## ПОЛЯРОННАЯ МОДЕЛЬ ФОРМИРОВАНИЯ СОСТОЯНИЙ ГИДРАТИРОВАННОГО ЭЛЕКТРОНА

© 2015 г. В. Д. Лахно<sup>1</sup>, А. В. Волохова<sup>2,\*</sup>, Е. В. Земляная<sup>2</sup>, И. В. Амирханов<sup>2</sup>,  
И. В. Пузынин<sup>2</sup>, Т. П. Пузынина<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт математических проблем биологии РАН, 142290 Пущино, Московская область, Россия

<sup>2</sup>Лаборатория информационных технологий, Объединенный институт ядерных исследований,  
141980 Дубна, Московская область, Россия

\*E-mail: volokhova@jinr.ru

Поступила в редакцию 09.04.2014 г.

В рамках динамической модели полярона проведено компьютерное моделирование формирования фотовозбужденных электронов в воде. Полученные результаты обсуждаются в сравнении с экспериментальными данными и теоретическими оценками.

*Ключевые слова:* гидратированный электрон, динамическая модель полярона, фотовозбуждение.

DOI: 10.7868/S020735281501014X

### ВВЕДЕНИЕ

В работе представлены результаты компьютерного моделирования процесса формирования фотовозбужденных (сольватированных, гидратированных) электронов в воде. Согласно современным представлениям, в результате радиолиза жидких и стеклообразных систем, как правило, возникают связанные (сольватированные) состояния электронов, в которых электрон не образует химических связей [1–4]. Такие состояния можно представить себе как захват избыточного электрона потенциальной ямой, образованной в результате поляризации электроном молекул среды.

Интерес к изучению сольватированного электрона связан, прежде всего, с тем, что с его участием происходит огромное число реакций 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. Важную информацию о структуре гидратированного электрона и кинетике химических реакций с его участием дает динамика спектров поглощения при его возникновении в облученной воде. Современные фемтосекундные спектроскопические методы дают детальную информацию о динамике образования гидратированных электронов, возбуждаемых в чистой воде посредством ее фотооблучения. Целью данной работы является разработка метода расчета, который бы адекватно описывал такую динамику.

### ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

При описании динамики спектров поглощения гидратированных электронов будем исходить из поляронной модели, в которой полярная среда рассматривается как непрерывная. Как показано в [5], это предположение, по-видимому, хорошо выполняется, если начальное состояние возбужденного электрона имеет достаточно большой характерный размер. В этом случае для расчета динамики образования гидратированного электрона будем исходить из функционала полной энергии  $E$  для оптического полярона Пекара [6, 7]:

$$E = \int d^3r \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\Psi|^2 - e\Phi|\Psi|^2 - \frac{1}{8\pi c\omega^2} (\nabla\dot{\Phi})^2 + \frac{1}{8\pi c} (\nabla\Phi)^2 \right\}, \quad (1)$$

где  $m$  – 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,  $\Phi$  – потенциал, возникающий в процессе поляризации.

Уравнения движения, отвечающие функционалу (1), имеют вид:

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

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

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

Здесь  $\theta$  имеет физический смысл плотности поляризационного заряда, индуцированного электроном. В соответствии с [5] вводим для потенциала поляризации  $\Phi$  релаксацию (трение), определяемую коэффициентом  $\gamma$ , связанным с временем диэлектрической релаксации  $\tau$  соотношением:

$$\gamma^{-1} = \omega^2 \tau c. \quad (5)$$

Тогда уравнение (4) принимает вид:

$$\frac{1}{4\pi\omega^2 c} \ddot{\theta}(\mathbf{r}, t) + \gamma \dot{\theta}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{4\pi c} \theta(\mathbf{r}, t) + e|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = 0. \quad (6)$$

Уравнения (2), (3), (6) определяют трехмерную динамическую модель полярона.

Отметим, что с учетом соотношения  $\nabla\Phi = 4\pi\mathbf{P}$ , где  $\mathbf{P}$  – поляризация среды, уравнение (6) может быть представлено в виде:

$$\ddot{\mathbf{P}} + \frac{1}{\tau} \dot{\mathbf{P}} + \omega^2 \mathbf{P} - \frac{\omega^2 c}{4\pi} \mathbf{D} = 0, \quad (7)$$

$$\mathbf{D} = e \int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} d^3 r', \quad (8)$$

где  $\mathbf{D}$  имеет физический смысл индукции, создаваемой электроном в полярной среде.

### МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И МЕТОД ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ

Подставляя в (2), (3), (6) разложения функций  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ ,  $\Phi(\mathbf{r}, t)$ ,  $\theta(\mathbf{r}, t)$  по сферическим гармоникам  $Y_{lm_s}(\theta_s, \varphi_s)$

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m_s=-l}^l \frac{\Psi_{lm_s}(r, t)}{r} Y_{lm_s}(\theta_s, \varphi_s),$$

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m_s=-l}^l \frac{\Phi_{lm_s}(r, t)}{r} Y_{lm_s}(\theta_s, \varphi_s),$$

$$\theta(\mathbf{r}, t) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m_s=-l}^l \frac{\theta_{lm_s}(r, t)}{r} Y_{lm_s}(\theta_s, \varphi_s)$$

и ограничивая наше рассмотрение сферически симметричным случаем  $m_s = l = 0$ , получаем систему пространственно одномерных дифференциальных уравнений в частных производных относительно радиальных составляющих  $\Psi_{00}(r, t)$ ,  $\Phi_{00}(r, t)$ ,  $\theta_{00}(r, t)$ , которая при переходе к безразмерным величинам принимает следующий вид

(здесь и далее нижние индексы 00 в обозначениях функций опущены):

$$\begin{cases} \left[ i2\bar{m} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2\bar{m} \frac{r_{00}}{\bar{\epsilon}} \frac{\Phi(x, t)}{x} \right] \Psi(x, t) = 0, \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Phi(x, t) = \theta(x, t), \\ \left[ \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \bar{\gamma} \frac{\partial}{\partial t} + \bar{\omega}^2 \right] \theta(x, t) = -\bar{\omega}^2 \frac{|\Psi(x, t)|^2}{x}, \end{cases} \quad (9)$$

с граничными условиями

$$\begin{aligned} \Phi(0, t) = \Phi(\infty, t) = 0, \quad \Psi(0, t) = \Psi(\infty, t) = 0, \\ \theta(0, t) = \theta(\infty, t) = 0, \end{aligned} \quad (10)$$

Уравнения (9) с граничными условиями (10) описывают эволюцию заданного в начальный момент времени состояния. Здесь  $\bar{\epsilon} = 1.81$  – коэффициент диэлектрической проницаемости,  $\bar{m} = 2.692$ ,  $\bar{\gamma} = 2.145$ ,  $\bar{\omega} = 1$  – приведенные к безразмерному виду параметры эффективной массы гидратированного электрона, релаксации (трения) и частоты;  $r_{00}$  – масштабирующий множитель,

$$r_{00} = \sqrt{t_{00}} = \sqrt{t_0/t_{A0}} = 164.64;$$

$t_0 = 1/\omega_0$ ,  $\omega_0 = 1.5246 \times 10^{12} \text{ c}^{-1}$  – характерная частота колебаний среды,  $t_{A0} = 2.42 \times 10^{-17} \text{ c}$  – атомная единица времени. Масштабирование введено, чтобы “уравновесить” отличающиеся более чем на десять порядков исходные значения физических параметров. При этом существенно (по закону  $x = r/r_{00}$ ) уменьшается интервал интегрирования по пространственной переменной, что облегчает компьютерное моделирование.

Переход от безразмерных переменных  $t$  и  $x$  к размерным значениям  $t_{\text{size}}$  и  $r$  осуществляется по формулам  $t_{\text{size}} = tt_0$ ,  $r = xr_{00}$ , где  $r_{00} = r_{00}a$ ,  $a = 0.529 \times 10^{-8} \text{ см}$  – борковский радиус. Связь эффективной массы гидратированного электрона  $m$ , частоты оптических поляризационных колебаний среды  $\omega$  и коэффициента трения  $\gamma$  с параметрами  $\bar{m}$ ,  $\bar{\omega}$ ,  $\bar{\gamma}$  из системы (9) определяется соотношениями  $m = \bar{m}m_e$  (где  $m_e$  – масса электрона в вакууме),  $\omega = \bar{\omega}/t_0$ ,  $\gamma = \bar{\gamma}/t_0$ .

Интеграл энергии рассчитывается по формуле:

$$\begin{aligned} W(t) = \frac{1}{2\bar{m}} \int \left| \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \right|^2 dx - \\ - \frac{r_{00}}{\bar{\epsilon}} \int \frac{\Phi(x, t) |\Psi(x, t)|^2}{x} dx. \end{aligned} \quad (11)$$

Для численного решения система дифференциальных уравнений (9) заменяется системой раз-

ностных уравнений на равномерной дискретной сетке. В результате подстановок известных конечно-разностных формул [8] получаем систему разностных уравнений, для решения которой был использован алгоритм, подробно описанный в [9] и позволяющий при заданных начальных условиях на каждом временном слое  $t^n$  последовательно вычислять  $\Theta(x, t^n)$ ,  $\varphi(x, t^n)$ ,  $\psi(x, t^n)$  в узлах дискретной сетки по  $x$ . Для ускорения вычислений разработана параллельная реализация данного алгоритма на основе технологии MPI, обеспечивающая почти двукратное уменьшение времени счета на двухпроцессорных (двухъядерных) системах.

### ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

**Стационарные решения.** Система (9) имеет стационарные, т.е. не зависящие от времени решения, удовлетворяющие задаче на собственные значения для системы обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \left[ \frac{d^2}{dx^2} - 2\bar{m}\lambda + 2\bar{m}\frac{r_{00}}{\varepsilon} \frac{\Phi_{st}(x)}{x} \right] \Psi_{st}(x) = 0, \\ \frac{d^2}{dx^2} \Phi_{st}(x) = -\frac{\Psi_{st}^2(x)}{x}, \end{cases} \quad 0 \leq x \leq \infty, \quad (12)$$

с граничными условиями и условиями нормировки:

$$\begin{cases} \Psi_{st}(0) = 0, \Phi_{st}(0) = 0, \\ \Psi_{st}(\infty) = 0, \Phi_{st}'(\infty) = 0, \end{cases} \quad \int_0^\infty \Psi_{st}^2(x) dx = 1. \quad (13)$$

Можно показать, что при использовании начальных условий для системы (9) в виде:

$$\begin{aligned} \psi(x, t)|_{t=0} &= \psi_k (\cos \lambda_k \xi + i \sin \lambda_k \xi), \\ \Theta(x, t)|_{t=0} &= -\frac{\Psi_k^2}{x}, \quad \frac{\partial}{\partial t} \Theta(x, t)|_{t=0} = 0, \end{aligned} \quad (14)$$

где  $\Psi_k$ ,  $\lambda_k$  – собственная функция задачи (12) с числом узлов  $k$  и соответствующее собственное значение, интеграл энергии (11) не зависит от времени, т.е. является константой, совпадающей в абсолютном значении с  $\lambda_k$ . Здесь  $\xi$  – произвольный множитель, который в расчетах полагали равным  $\pi/4$ .

Поэтому для проверки корректности вычислительной схемы, используя непрерывный аналог метода Ньютона [10], получили три решения задачи (12) с числом узлов  $k = 0, 1, 2$ . Соответствующие собственные значения равны

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

С использованием этих решений смоделированы начальные условия (14) и проведены тестовые расчеты, в результате которых было установлено, что при выборе шагов дискретной сетки по  $x$  и  $t$

соответственно  $h_x = 10^{-5}$  и  $h_t = 10^{-7}$  интеграл энергии  $W(t)$  и формы кривых решений системы (9) не изменяются в течение физически значимого промежутка времени. Это подтверждает корректность вычислительной схемы и MPI/C++-реализации.

**Сравнение  $W$  с теоретической оценкой.** Согласно теоретическим оценкам [5] значение интеграла энергии, соответствующее основному стационарному состоянию полярона  $k = 0$ , равно

$$W_0(\infty) = -0.163 \frac{m_e^4}{\hbar^2} c^2, \quad (15)$$

где  $c = 0.552$ ,  $m = 2.692m_e$ ,  $m_e$  – масса электрона в вакууме. Учитывая, что  $E = e^2/a = 27.2$  эВ, где  $a = \hbar^2/(m_e e^2)$  – боровский радиус, теоретическая оценка дает  $W_0 = -3.637$  эВ. Согласно нашим расчетам после перехода к размерным единицам (эВ) получаем:

$$\begin{aligned} W_0 &= (W_0^{\text{num}}/r_{00}^2) E = \\ &= (3625.55/164.64^2) \times 27.2 = -3.638. \end{aligned} \quad (16)$$

Следовательно, рассчитанные в рамках нашей модели значения  $W_0$  согласуются с теорией.

**Расчет интенсивности поглощения.** Для воспроизведения экспериментальных значений интенсивности поглощения света гидратированным электроном начальные условия волновой функции  $\psi$  выбирали в гауссовой форме. Начальное условие для функции  $\Theta$  аналогично (14). Начальное значение  $\varphi$  является решением второго уравнения системы (9) с  $\Theta(x, 0)$  в правой части.

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

$$\psi(x, 0) = F_g(\tilde{x}) \sqrt{4\pi\tilde{x}} \sqrt{r_{00}}, \quad \tilde{x} = x r_{00}, \quad (17)$$

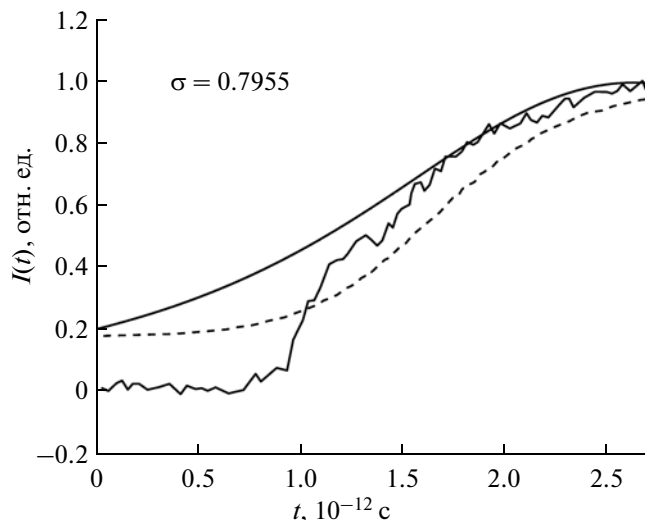
где

$$F_g(x) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{3/4} \frac{1}{\sigma^{3/2}} \exp(-x^2/\sigma^2). \quad (18)$$

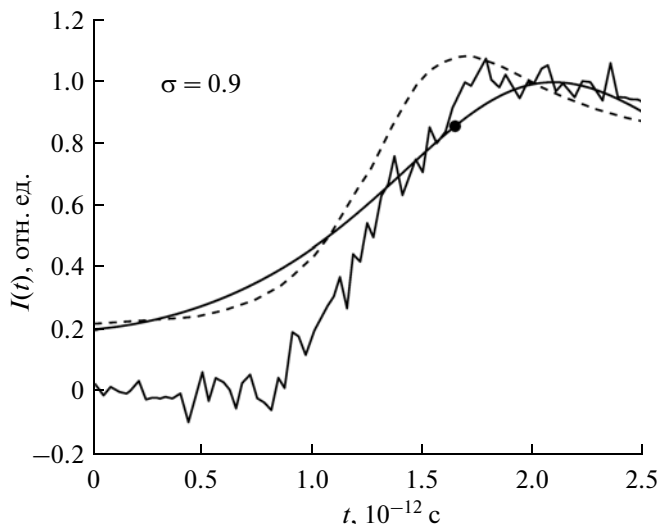
Параметр  $\sigma$  выбирался так, чтобы при компьютерном моделировании получить согласующуюся с экспериментальными данными из [11] временную зависимость интенсивности поглощения света водой. Выражение для расчета поглощения имеет вид [5]:

$$I(\Omega, t) = \frac{4\Omega^2 \gamma_s^2}{(W(t)^2 - \Omega^2)^2 + 4\Omega^2 \gamma_s^2}, \quad (19)$$

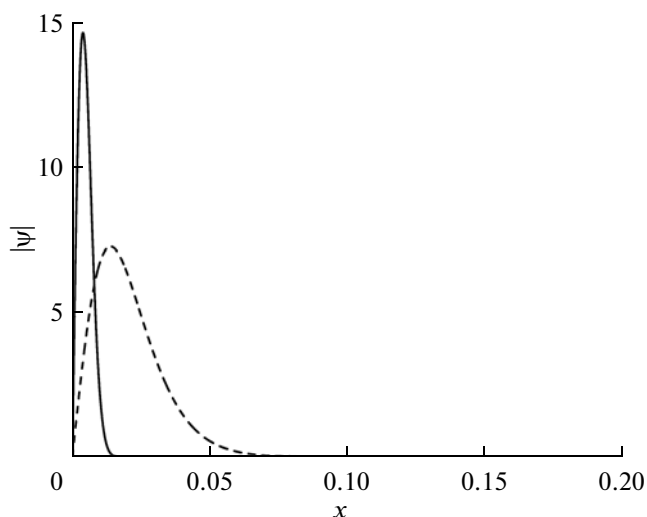
где  $\gamma_s = 0.38$  эВ – ширина полосы поглощения гидратированного электрона в чистом виде, а  $\Omega$  имеет физический смысл частоты света сканирующего лазера, на которой происходит поглощение света гидратированным электроном [5].



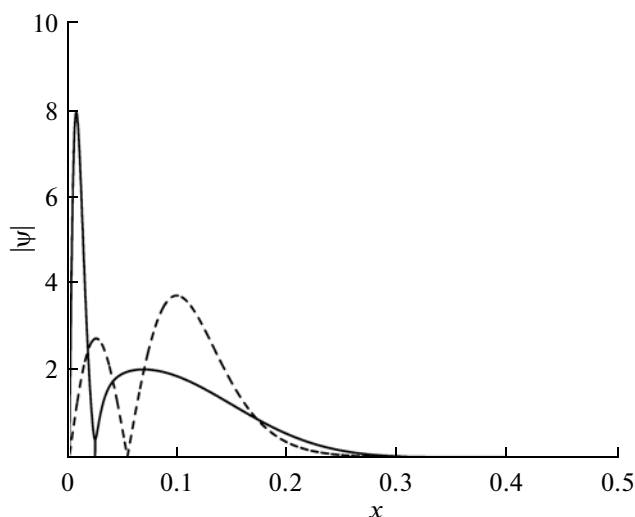
**Рис. 1.** Эволюция интенсивности поглощения света гидратированным электроном при  $\Omega = 1.984$  эВ. Зубчатая кривая – эксперимент [11], сплошная кривая – расчет в этой работе, штриховая кривая – приближенная теоретическая оценка [5].



**Рис. 2.** То же, что на рис. 1, но для  $\Omega = 1.512$  эВ и  $\sigma = 0.9$ . Жирной точке соответствует график  $|\psi(x)|$ , показанный на рис. 4.



**Рис. 3.** Функция  $|\psi|$  в момент времени  $t = 0$ , рассчитанная по формуле (17) для  $\sigma = 0.9$  (сплошная линия) в сравнении с безузловым решением  $\Psi_0$  стационарной задачи (12) (штриховая линия).



**Рис. 4.** Функция  $|\psi|$  для случая  $\Omega = 1.512$  эВ и  $\sigma = 0.9$ , соответствующая жирной точке на рис. 2 (сплошная линия), в сравнении с одноузловым решением  $\Psi_1$  стационарной задачи (12) (штриховая линия).

Расчеты проводились для  $\Omega = 1.984$  и  $1.512$  эВ. На рис. 1 и 2 для этих двух случаев показаны результаты совмещения экспериментальных данных из [11], приближенных теоретических оценок из [5] и полученных в данной работе расчетных кривых. 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 и экспериментальных данных на начальном участке

графика можно объяснить тем, что в формуле (19) не учитывается зависимость величины  $\gamma_s$  от времени. Уточнение метода расчета  $I(\Omega, t)$  является предметом дальнейших исследований.

Рис. 3 и 4 демонстрируют, как трансформируется волновая функция  $\psi$  в процессе компьютерного моделирования для случая, изображенного на рис. 2 ( $\Omega = 1.512$  эВ). На рис. 3 сплошной кривой показана функция  $|\psi|$  в начальный момент времени  $t = 0$ , рассчитанная по формуле (17). Для сравнения штриховой кривой приведено безузловое решение  $\Psi_0$  стационарной задачи (12). При временах в области максимума  $I(t)$  форма функ-

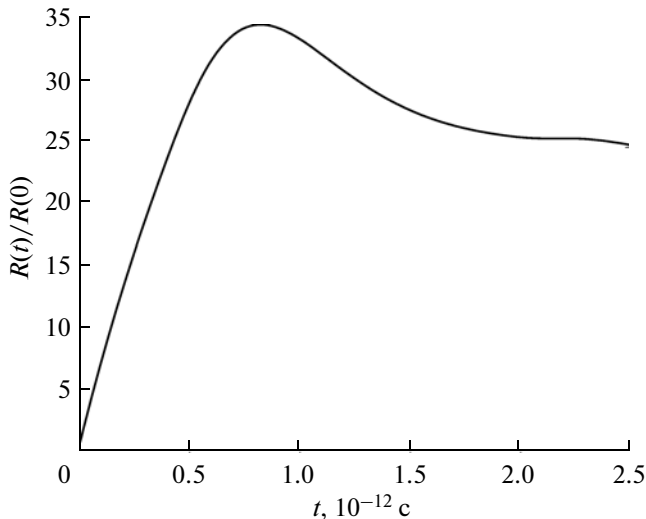


Рис. 5. Зависимость  $R(t)/R(0)$  для случая  $\Omega = 1.984$  эВ,  $\sigma = 0.7955$ .

ции  $\psi$  соответствует одноузловой функции. Это видно на рис. 4, где сплошной кривой показана функция  $|\psi|$ , соответствующая жирной точке на графике поглощения на рис. 2. Для сравнения штриховой кривой показано одноузловое стационарное решение  $|\Psi|$ . При дальнейшем моделировании  $\psi$  снова принимает форму безузловой функции, в то время как  $I \rightarrow 0$ . В случае, соответствующем рис. 1 ( $\Omega = 1.984$  эВ), функция  $\psi$  претерпевает аналогичные трансформации.

**Расчет радиуса волновой функции.** Динамика изменения характерного размера (радиуса) волновой функции  $\Psi$  определяется интегралом

$$R(t) = \int |\Psi|^2 r dr^3. \quad (20)$$

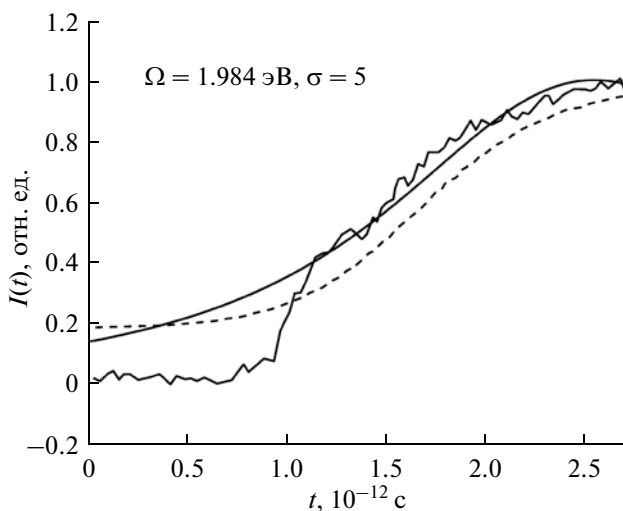


Рис. 6. То же, что на рис. 1, но для  $\sigma = 5$ .

В терминах системы (9) формула для расчета радиуса в размерных величинах принимает вид:

$$R(t) = r_0 \int |\psi|^2 r dr. \quad (21)$$

На рис. 5 эта зависимость показана для случая  $\sigma = 0.7955$ ,  $\Omega = 1.984$ . Для наглядности здесь изображена нормированная функция  $R(t)/R(0)$ . Значение радиуса в начальный момент времени составляет  $0.33 \times 10^{-8}$  см. В процессе эволюции радиус  $R(t)$  возрастает более чем в 30 раз и достигает максимума раньше по сравнению с функцией  $I(t)$  на рис. 1. Далее постепенно радиус уменьшается и в области максимума функции  $I(t)$  стабилизируется при значениях около  $8.3 \times 10^{-8}$  см.

Конечное значение радиуса не противоречит известным оценкам  $2-3 \times 10^{-8}$  см [1]. Однако из физических соображений следовало бы ожидать другой динамики изменения радиуса в процессе формирования поляронного состояния, а именно, изменения от больших значений в начальный момент времени к меньшим. Поэтому были проведены дополнительные вычисления с целью поиска альтернативных значений  $\sigma$ , которые адекватно воспроизводили бы наблюдаемую в экспериментах динамику  $I(t)$  и при этом обеспечивали бы уменьшение радиуса. Одновременное выполнение указанных требований достигается для случаев  $\Omega = 1.984$  и  $1.512$  соответственно при  $\sigma = 5$  и  $5.75$ . Соответствующие кривые интенсивности (в сравнении с теоретическими и экспериментальными результатами) даны на рис. 6 и 7. Динамика изменения радиуса (в см) показана на рис. 8 сплошной кривой для  $\Omega = 1.984$ ,  $\sigma = 5$  и штриховой для  $\Omega = 1.512$ ,  $\sigma = 5.75$ . Видно, что значение радиуса в этом случае падает с ростом  $t$ , однако как начальное значение  $2.4-2.6 \times 10^{-8}$  см, так и конечное

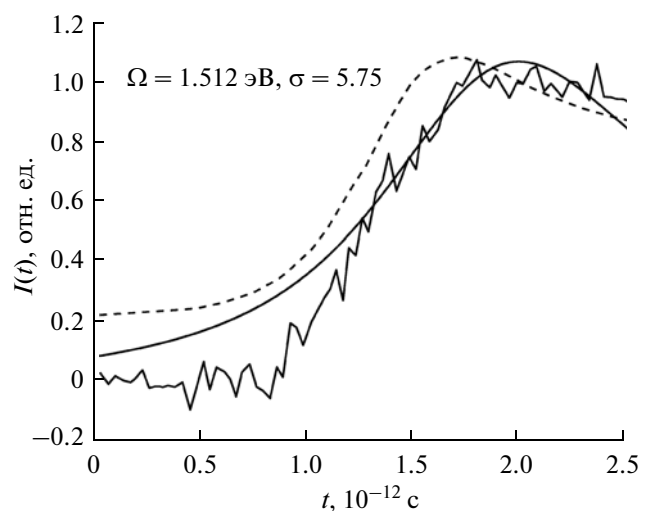


Рис. 7. То же, что на рис. 2, но для  $\sigma = 5.75$ .

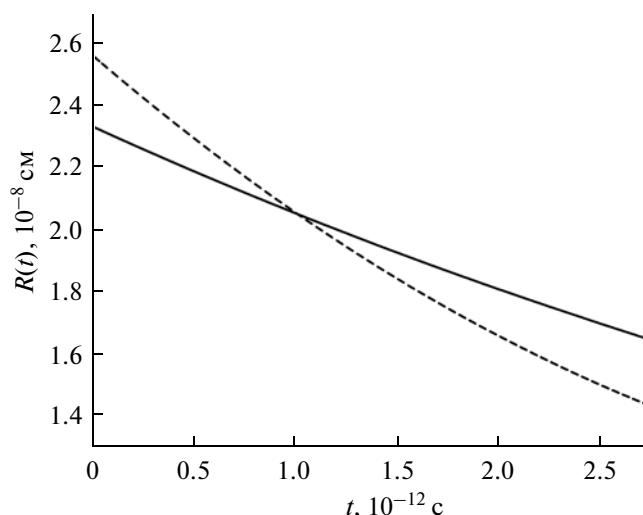


Рис. 8. Зависимость  $R(t)$  для случая  $\Omega = 1.984$  эВ,  $\sigma = 5$  (сплошная кривая) и для случая  $\Omega = 1.512$ ,  $\sigma = 5.75$  (штриховая).

$1.5\text{--}1.7 \times 10^{-8}$  см близки к упомянутой выше оценке  $2\text{--}3 \times 10^{-8}$  см. Таким образом, разработанный в данной работе подход позволяет адекватно воспроизводить динамику изменения интенсивности поглощения света гидратированным электроном.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты численного моделирования приводят к интересным выводам. Прежде всего, они свидетельствуют о том, что исходное состояние фотовозбужденного “сухого” электрона является достаточно локализованным: согласно рис. 8 его радиус  $R(0) \sim 2.5 \times 10^{-8}$  см. Так как согласно рассматриваемой модели фотопоглощение электрона происходит в “зону проводимости” воды, то можно сделать вывод, что даже в чистой воде эта зона содержит флуктуации потенциала (например, полости), которыми захватываются фотовозбужденные электроны, образуя исходно затравочные локализованные состояния. В процессе дальнейшей эволюции происходит углубление флуктуационных потенциальных ям, что приводит к понижению энергии электрона и уменьшению его радиуса состояния  $R(0) \sim 1.5 \times 10^{-8}$  см. В целом такая картина вполне соответствует совре-

менным представлениям о динамике гидратированного электрона.

Таким образом, разработана и программно реализована динамическая модель формирования состояний гидратированного электрона. Корректность работы соответствующей компьютерной 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 лазерного облучения в ультрафиолетовом диапазоне. Модель может быть использована для дальнейших расчетов и прогнозов при изучении динамики поляронных состояний как в водной среде, так и в иных конденсированных средах.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (гранты № 12-01-00396, № 13-01-00595, № 13-01-00060, 13-07-00256).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Hart E.H., Anbar M.* The Hydrated Electron. New York: Wiley, 1970. 267 p.
2. *Pikaev A.K.* The Solvated Electron in Radiation Chemistry. Jerusalem: World University, 1970. 457 p.
3. Excess Electrons in Dielectric Media / Eds. Ferradini C., Jay-Gerin J.P. Boca Rato. CRC Press, 1991. 456 p.
4. Ultrafast Reaction Dynamics and Solvent Effects, Royaumont, France / AIP Conf. Proceed. V. 298 / Eds. Gauduel Y., Rossky P.J. New York: AIP, 1994. 564 p.
5. *Lakhno V.D.* // Chem. Phys. Lett. 2007. V. 437. P. 198.
6. *Пекар С.И.* Исследования по электронной теории кристаллов. М.: Госстехиздат, 1951. 258 с.
7. *Давыдов А.С., Энольский В.З.* // ЖЭТФ. 1981. Т. 81. Вып. 3(9). С. 1088.
8. *Березин И.С., Жидков Н.П.* Методы вычислений. Т. 2. М.: Физматгиз, 1959. 620 с.
9. *Амирханов И.В., Земляная Е.В., Лакно В.Д.* // Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед. 2011. № 1. С. 66.
10. *Пузынин И.В., Амирханов И.В., Земляная Е.В. и др.* // ЭЧАЯ. 1999. Т. 30. Вып. 1. С. 210.
11. *Long F.H., Lu H., Eisenthal K.B.* / Phys. Rev. Lett. 1990. V. 64. № 12. P. 1469.

## Polaron Model of Hydrated Electron State Formation

V. D. Lakhno, A. V. Volokhova, E. V. Zemlyanaya, I. V. Amirkhanov, I. V. Puzynin, T. P. Puzynina

The formation of photoexcited electron states in the water is numerically analysed using the dynamic polaron model. Results of numerical simulation are discussed in comparison with experimental data and theoretical estimations.