

P11-2014-19

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

ПОЛЯРОННАЯ МОДЕЛЬ ФОРМИРОВАНИЯ  
СОСТОЯНИЙ ГИДРАТИРОВАННОГО ЭЛЕКТРОНА

Направлено в журнал «Поверхность. Рентгеновские, синхротронные  
и нейтронные исследования»

---

<sup>1</sup> Институт математических проблем биологии Российской академии  
наук, Пущино, Россия

\* E-mail: lak@impb.psn.ru

\*\* E-mail: volokhova@jinr.ru

Лахно В. Д. и др.

P11-2014-19

Поляронная модель формирования состояний гидратированного электрона

В рамках динамической модели полярона проведено численное исследование формирования фотовозбужденных электронов в воде. Полученные результаты компьютерного моделирования обсуждаются в сравнении с экспериментальными данными и теоретическими оценками.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2014

Lakhno V. D. et al.

P11-2014-19

Polaron Model of the Hydrated Electron States Formation

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

The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2014

## ВВЕДЕНИЕ

В работе представлены результаты численного исследования 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 поляризационной потенциальной ямой, образованной индуцированной им поляризацией окружающих его молекул среды.

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. 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 данной работы является разработка метода расчета, который адекватно описывал бы такую динамику.

В разд. 1 описана физическая модель полярона. В разд. 2 представлена математическая постановка задачи и описан численный подход к ее решению. В разд. 3 представлены результаты методических расчетов, сделанных для проверки корректности модели и ее C++-реализации; обсуждаются результаты численного моделирования в сравнении с теоретическими и экспериментальными оценками. Основные выводы изложены в заключении.

## 1. 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;  $e$  — заряд электрона;  $c = \varepsilon_\infty^{-1} - \varepsilon_0^{-1}$ ,  $\varepsilon_\infty$  и  $\varepsilon_0$  — высокочастотная и статическая диэлектрические постоянные;  $\omega$  — частота оптических поляризационных колебаний среды;  $\Phi$  — потенциал, создаваемый поляризацией.

Уравнения движения, отвечающие функционалу (1), имеют вид

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

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

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

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 со 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

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

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

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

## 2. 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  $Y_{lm_s}(\theta_s, \phi_s)$

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{r}, t) &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m_s=-l}^l \frac{\psi_{lm_s}(r, t)}{r} Y_{lm_s}(\theta_s, \phi_s), \\ \Phi(\mathbf{r}, t) &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m_s=-l}^l \frac{\phi_{lm_s}(r, t)}{r} Y_{lm_s}(\theta_s, \phi_s), \\ \theta(\mathbf{r}, t) &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m_s=-l}^l \frac{\Theta_{lm_s}(r, t)}{r} Y_{lm_s}(\theta_s, \phi_s)\end{aligned}$$

и ограничивая наше рассмотрение сферически-симметричным случаем  $m_s = l = 0$ , получаем систему пространственно-одномерных дифференциальных уравнений в частных производных относительно функций  $\psi_{00}(r, t)$ ,  $\phi_{00}(r, t)$ ,  $\Theta_{00}(r, t)$ , которая при переходе к безразмерным величинам принимает следующий вид (здесь и далее нижние индексы 00 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

$$\phi(0, t) = \phi'(\infty, t) = 0, \quad \psi(0, t) = \psi(\infty, t) = 0, \quad \Theta(0, t) = \Theta(\infty, t) = 0. \quad (10)$$

Уравнения (9) с граничными условиями (10) описывают эволюцию заданного в начальный момент времени состояния. Здесь  $\bar{\epsilon} = 1,81$  — коэффициент диэлектрической проницаемости;  $\bar{m} = 2,692$ ,  $\bar{\gamma} = 2,145$ ,  $\bar{\omega} = 1$  — безразмерные параметры эффективной массы гидратированного электрона, релаксации (трения) и частоты;  $r_{00}$  — масштабирующий множитель:

$$r_{00} = \sqrt{t_{00}} = \sqrt{t_0/t_{A0}} = 164,64;$$

$t_0 = 1/\omega_0$ ,  $\omega_0 = 1,5246 \cdot 10^{12} \text{ с}^{-1}$  — характерная частота колебаний среды;  $t_{A0} = 2,42 \cdot 10^{-17} \text{ с}$  — атомная единица времени. Масштабирование введено,

чтобы «уравновесить» отличающиеся более чем на 10 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  $t_{\text{size}} = t \cdot t_0$ ,  $r = x \cdot r_0$ , где  $r_0 = r_{00} \cdot a$ ,  $a = 0,529 \cdot 10^{-8}$  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  $m = \bar{m} \cdot m_e$  (где  $m_e$  — масса электрона в вакууме),  $\omega = \bar{\omega}/t_0$ ,  $\gamma = \bar{\gamma}/t_0$ .

Интеграл энергии рассчитывается по формуле

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

Для численного решения система дифференциальных уравнений (9) заменяется системой разностных уравнений на равномерной дискретной сетке с шагами  $h_x$  и  $h_t$  соответственно пространственной и временной координатам. В результате подстановок известных конечно-разностных формул [8] получаем систему разностных уравнений, для решения которой мы использовали алгоритм, подробно описанный в [9] и позволяющий при заданных начальных условиях на каждом временном слое  $t^n$  последовательно вычислять  $\Theta(x, t^n)$ ,  $\phi(x, t^n)$  и  $\psi(x, t^n)$  в узлах дискретной сетки по  $x$ . Для ускорения вычислений разработана параллельная реализация данного алгоритма на основе технологии MPI, обеспечивающая почти двухкратное уменьшение времени счета на двухпроцессорных (двухъядерных) системах.

### 3. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

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

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

с граничными условиями и с условием нормировки

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

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

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

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 мы полагали равным  $\pi/4$ .

Поэтому для проверки корректности вычислительной схемы были вычислены на основе непрерывного аналога метода Ньютона [10] три решения задачи (12) с числом узлов  $k = 0, 1, 2$ . Соответствующие собственные значения получились следующими:

$$\lambda_0 = 3625,55; \quad \lambda_1 = 685,97; \quad \lambda_2 = 279,01.$$

С использованием этих решений построены начальные условия (14) и проведены тестовые расчеты, в результате которых было установлено, что при выборе  $h_x = 10^{-5}$  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.

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

$$W_0(\infty) = -0,163 \frac{m^* e^4}{\hbar^2} c^2,\tag{15}$$

где  $c = 0,552$ ;  $m^* = 2,692 \cdot m_e$ ,  $m_e$  — масса электрона в вакууме. Учитывая, что  $E = e^2/a = 27,2$  эВ, где  $a = \hbar^2/(m_e \cdot e^2)$  — боровский радиус, теоретическая оценка дает  $W(\infty) = -3,637$  эВ. Согласно нашим расчетам после перехода к размерным единицам (эВ) получаем

$$W_0 = (W_0^{\text{num}}/r_{00}) \times E = (3625,55/164,64^2) \times 27,2 = -3,638.\tag{16}$$

Следовательно, рассчитанные в рамках нашей модели значения  $W(\infty)$  вполне согласуются с теорией.

**3.3. Расчет интенсивности поглощения.** Для воспроизведения экспериментальных данных интенсивности поглощения света гидратированным электроном начальные значения волновой функции  $\psi$  выбирались в гауссовской форме. Начальное условие для функции  $\Theta$  аналогично (14). Начальное значение  $\phi$  является решением второго уравнения системы (9) с  $\psi(x, 0)$  в правой части.

С учетом сферической симметрии и перемасштабирования функция  $\psi$  в момент времени  $t = 0$  рассчитывалась 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 интенсивности поглощения имеет вид

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

где  $\gamma_s = 0,38$  эВ — ширина полосы поглощения гидратированного электрона, а  $\Omega$  имеет физический смысл частоты света сканирующего лазера, на которой происходит поглощение света гидратированным электроном [5].

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 нами расчетных кривых. 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

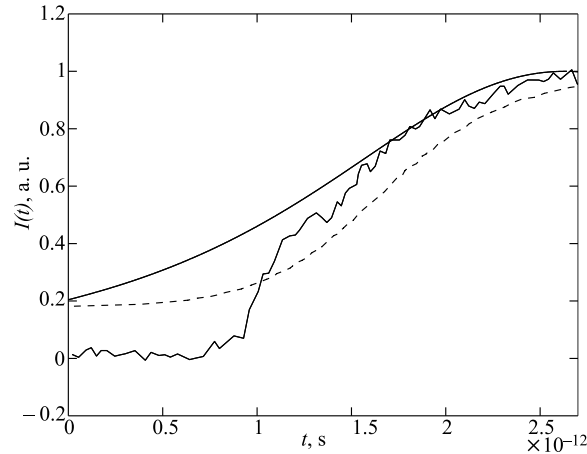


Рис. 1. Эволюция интенсивности поглощения света гидратированным электроном при  $\Omega = 1,984$  эВ. Зубчатая кривая — эксперимент [11], сплошная гладкая кривая — наш расчет, штриховая кривая — приближенная теоретическая оценка [5]



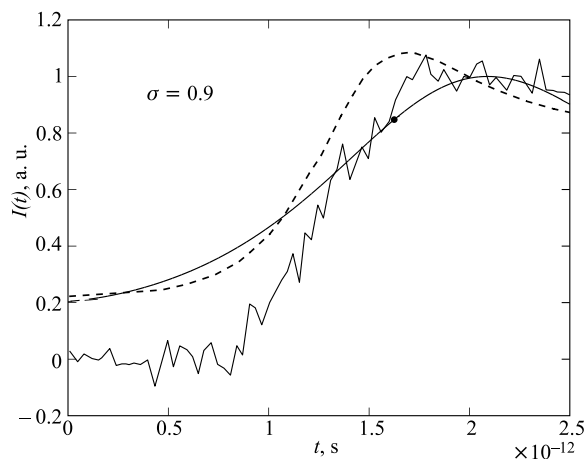


Рис. 2. То же, что на рис. 1, но для  $\Omega = 1,512$  эВ. Жирной точке соответствует график  $|\psi(x)|$ , показанный на рис. 4

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

На рис. 3, 4 продемонстрировано, 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 отмечено безузловое решение  $\Psi_0$  стационарной

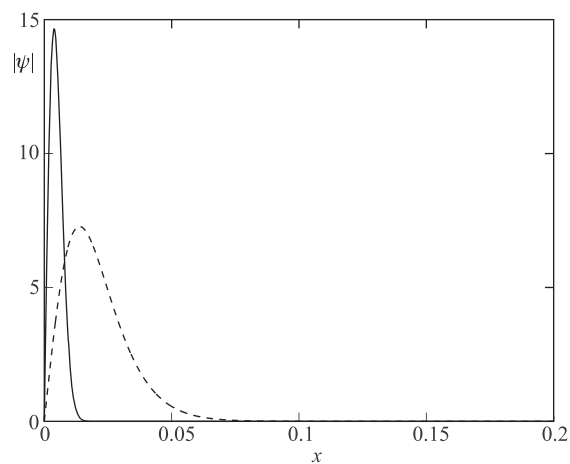


Рис. 3. Функция  $|\psi|$  в момент времени  $t = 0$ , рассчитанная по формуле (17) для  $\sigma = 0,9$  (сплошная кривая), в сравнении с безузловым решением  $\Psi_0$  стационарной задачи (12) (штриховая кривая)

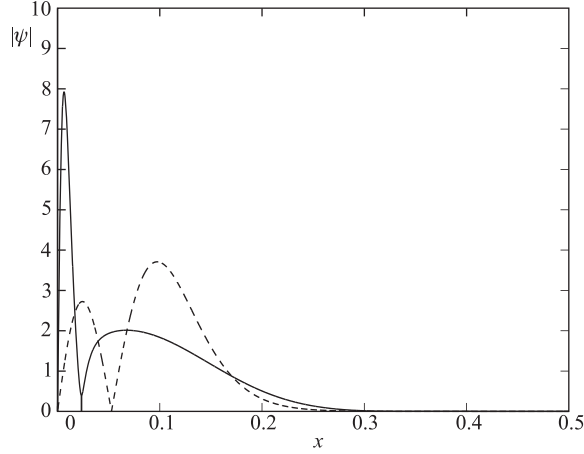


Рис. 4. Функция  $|\psi|$  для случая  $\Omega = 1,512$  эВ и  $\sigma = 0,9$ , соответствующая жирной точке на рис.2 (сплошная кривая), в сравнении с одноузловым решением  $\Psi_1$  стационарной задачи (12) (штриховая кривая)

задачи (12). При временах, соответствующих области максимума  $I$ , функция  $\psi$  трансформируется в форму одноузловой функции. Это видно на рис. 4, где сплошной кривой показана функция  $|\psi|$ , соответствующая жирной точке на графике интенсивности на рис. 2. Для сравнения штриховой кривой показано одноузловое стационарное решение  $\Psi_1$ . При дальнейшем моделировании  $\psi$  постепенно снова принимает форму безузловой функции, в то время как  $I \rightarrow 0$ . Для случая, соответствующего рис. 1 ( $\Omega = 1,984$  эВ), функция  $\psi$  претерпевает аналогичные трансформации.

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

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

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 мы здесь изобразили нормированную функцию  $R(t)/R(0)$ . Значение радиуса в начальный момент времени составляет  $0,33 \cdot 10^{-8}$  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 на значениях около  $8,3 \cdot 10^{-8}$  см.

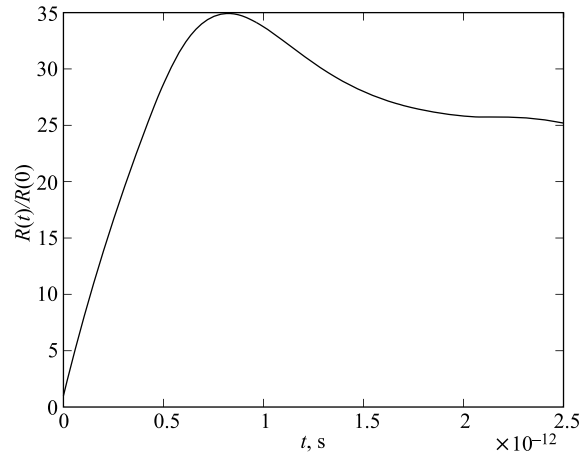


Рис. 5. Зависимость  $R(t)/R(0)$  для случая  $\Omega = 1,984$ ,  $\sigma = 0,7955$

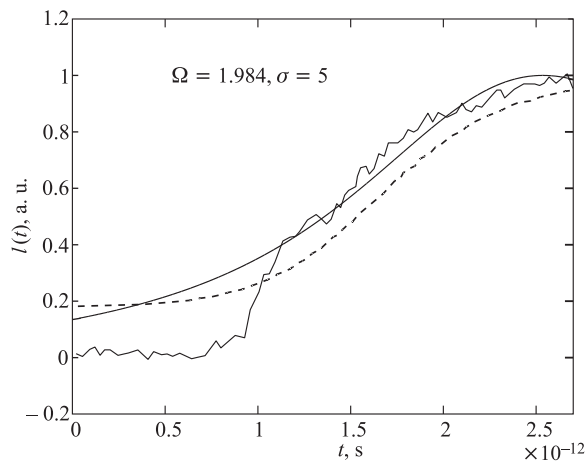


Рис. 6. То же, что на рис. 1, но для  $\sigma = 5$

Конечное значение радиуса не противоречит известным оценкам  $(2-3) \cdot 10^{-8}$  см [1]. Однако из физических соображений следовало бы ожидать другой динамики изменения радиуса в процессе формирования полярного состояния, а именно — изменения от больших значений в начальный момент времени к меньшим. Поэтому мы провели дополнительные вычислительные эксперименты с целью поиска альтернативных значений  $\sigma$ , которые адекватно воспроизводили бы наблюдаемую в экспериментах динамику  $I(t)$  и при этом обеспечивали бы уменьшение радиуса волновой функции. Одновременное выполнение указанных требований достигается для случаев  $\Omega = 1,984$

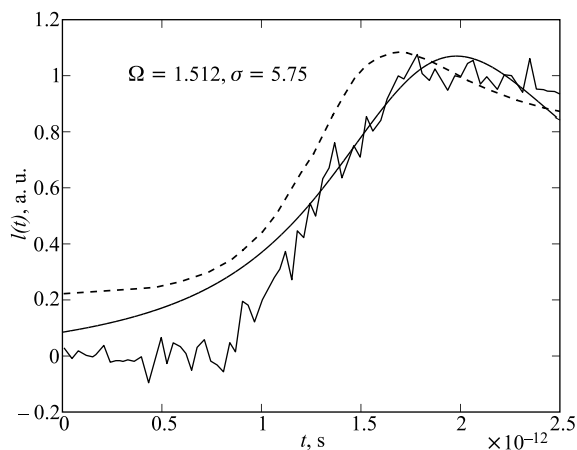


Рис. 7. То же, что на рис. 2, но для  $\sigma = 5,75$

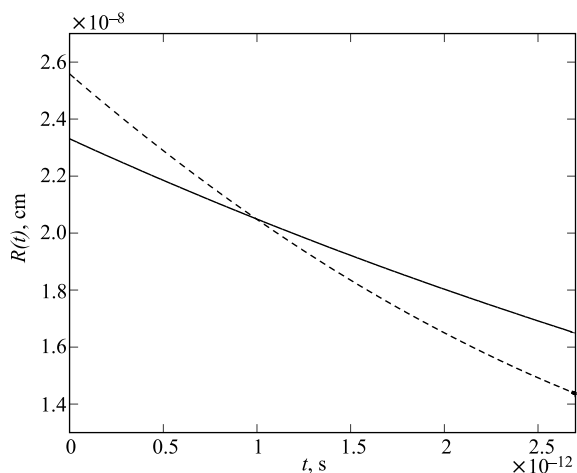


Рис. 8. Зависимость  $R(t)$  для случая  $\Omega = 1,984$ ,  $\sigma = 5$  (сплошная кривая) и для случая  $\Omega = 1,512$ ,  $\sigma = 5,75$  (штриховая кривая)

и 1,512 соответственно при  $\sigma = 5$  и 5,75. Соответствующие кривые интенсивности поглощения (в сравнении с теоретическими и экспериментальными результатами) даны на рис. 6 и 7. Динамика изменения радиуса показана на рис. 8 сплошной кривой для  $\Omega = 1,984$  и штриховой — для  $\Omega = 1,512$ . Видно, что значение радиуса в этом случае падает с ростом  $t$ , однако как начальное его значение  $(2,4-2,6) \cdot 10^{-8}$  см, так и конечное  $(1,5-1,7) \cdot 10^{-8}$  см близки к упомянутой выше оценке  $(2-3) \cdot 10^{-8}$  см. Таким образом, разработанный нами 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  $R(0) \sim 2,5 \cdot 10^{-8}$  см. Так как в рассматриваемой модели фотопоглощение электрона происходит в «зону проводимости» воды, 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  $R \sim 1,5 \cdot 10^{-8}$  см. В целом такая картина вполне соответствует современным представлениям о динамике гидратированного электрона.

Таким образом, нами 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 удается 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 финансовой поддержке РФФИ (гранты 12-01-00396, 13-01-00595, 13-07-00256, 13-01-00060).

## ЛИТЕРАТУРА

1. *Hart E. H., Anbar M.* The Hydrated Electron. N. Y.: Wiley, 1970.
2. *Pikaev A. K.* The Solvated Electron in Radiation Chemistry. Jerusalem: World University, 1970.
3. Excess Electrons in Dielectric Media / Eds.: C. Ferradini, J. P. Jay-Gerin. Boca Rato: CRC Press, 1990. P. 368.
4. Ultrafast Reaction Dynamics and Solvent Effects, Royaumont, France // AIP Conf. Proc. V. 298 / Eds.: Y. Gauduel, P. J. Rossky. N. Y.: AIP, 1994.
5. *Lakhno V. D.* Dynamical Polaron Theory of the Hydrated Electron // Chem. Phys. Lett. 2007. V. 437. P. 198–202.

6. Пекар С.И. Исследования по электронной теории кристаллов. М.: Гостехиздат, 1951.
7. Давыдов А. С., Энольский В. З. Трехмерный солитон в ионном кристалле // ЖЭТФ. 1981. Т. 81, вып. 3(9). С. 1088.
8. Березин И. С., Жидков Н.П. Методы вычислений. Т. 2. М., 1959.
9. Amirhanov I. V. et al. Mathematical Modeling of the Evolution of Polaron States // J. of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2011. V. 5, No. 1. P. 60–64.
10. Пузынин И.В. и др. Обобщенный непрерывный аналог метода Ньютона для численного исследования некоторых нелинейных квантово-полевых моделей // ЭЧАЯ. 1999. Т. 30, вып. 1.
11. Long F. H., Lu H., Eiseenthal K. B. Femtosecond Studies of the Presolvated Electron: An Excited State of the Solvated Electron // Phys. Rev. Lett. 1990. V. 64, No. 12. P. 1469–1472.

Получено 13 марта 2014 г.

Редактор *Е. В. Сабеева*

Подписано в печать 06.05.2014.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 0,9. Уч.-изд. л. 1,1. Тираж 245 экз. Заказ № 58255.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований  
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: [publish@jinr.ru](mailto:publish@jinr.ru)

[www.jinr.ru/publish/](http://www.jinr.ru/publish/)