

## **1. Анкетные данные**

ФИО: Плотникова Анастасия Викторовна

Год рождения: 1990 г.

Образование:

Волгоградский государственный университет, 2012 г., бакалавр физики  
по направлению «Физика»

Волгоградский государственный университет, 2014 г., магистр по  
направлению «Физика»

## **2. Достижения в результате освоения основной образовательной программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре**

В результате освоения основной образовательной программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре за 1 год обучения были сданы следующие экзамены и зачеты:

1. Кандидатский экзамен по дисциплине «История и философия науки» с оценкой «хорошо»;
2. Кандидатский экзамен по дисциплине «Иностранный язык» с оценкой «отлично»;
3. Зачет по дисциплине «Информационно-библиографические технологии в НИР» с оценкой «хорошо»;
4. Зачет по дисциплине «Научно-исследовательская работа» с оценкой «отлично»;
5. Зачет по дисциплине «Научно-исследовательский семинар» с оценкой «отлично».

### **3. Достижения в научно-исследовательской деятельности**

#### **3.1 Обоснование темы диссертации**

Утверждено на заседании кафедры ТФ и ВП

от 18.09.2014 протокол № 8

Зав. кафедрой ТФ и ВП ФТИ

Михайлова В.А.

**Аспирант:** Плотникова Анастасия Викторовна

**Научный руководитель:** д. ф.-м.н., профессор Иванов Анатолий Иванович

**Специальность:** Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

**Тема диссертационного исследования:** «Проявление сверхбыстрых фотохимических процессов в нестационарных спектрах»

#### **Обоснование темы диссертационной работы.**

**Актуальность темы исследования:** Исследование проблемы переноса электрона в конденсированных средах привлекает внимание исследователей во всем мире уже на протяжении нескольких десятилетий. Несмотря на растущие возможности экспериментального подхода и прогресс квантово-химических теорий, центральная проблема сверхбыстрых фотохимических реакций переноса электрона – управления их скоростью и квантовым выходом продуктов – все еще остается актуальной. Это требует систематизации накопленных экспериментальных фактов и разработанных теоретических подходов, что позволит выявить наиболее важные тенденции в развитии теории сверхбыстрых фотохимических процессов и прогнозировать наиболее вероятные достижения в ближайшие годы.

## **Цели и задачи исследования:**

### *Цель исследования:*

Построить теорию нестационарных спектров молекулярных систем со сверхбыстрыми фотохимическими реакциями.

### *Задачи исследования:*

1. Разработать физическую и математическую модель.
2. Построить расчетную схему и ее компьютерная реализация.
3. Исследовать численными методами закономерности спектральной динамики.

## **Методологические и теоретические основы исследования:**

1. Исходной является стохастическая многоканальная модель.
2. Совокупность экспериментальных и теоретических исследований, опубликованных в текущей литературе.

### 3.2. Копии грамот и публикаций



Правительство Волгоградской области  
Совет ректоров вузов Волгоградской области

# БЛАГОДАРНОСТЬ

**Награждается**

аспирант кафедры ТФиВП ВолГУ

**Плотникова Анастасия Викторовна**

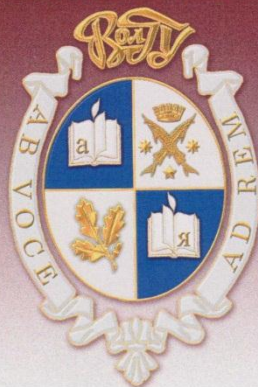
за работу «Влияние переноса заряда на спектральную динамику,  
измеряемую по схеме “накачка-зондирование”»,  
представленную на XIX Региональной конференции молодых  
исследователей Волгоградской области 2014 г.  
по направлению «Физика и математика»

Зам. председателя Правительства  
Волгоградской области

А. И. Блошкин



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



ВОЛГОГРАДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

# ДИПЛОМ

**I СТЕПЕНИ**

молодой ученый

**ПЛОТНИКОВА  
АНАСТАСИЯ ВИКТОРОВНА**

за работу « Динамика спектров  
поглощения из основного состояния в  
донорно-акцепторных парах со  
сверхбыстрой рекомбинацией заряда »,  
представленную  
на конкурс научных работ молодых  
ученых, студентов и школьников  
в рамках Научной сессии ВолГУ 2015 г.  
по направлению  
« Физические науки »



Ректор

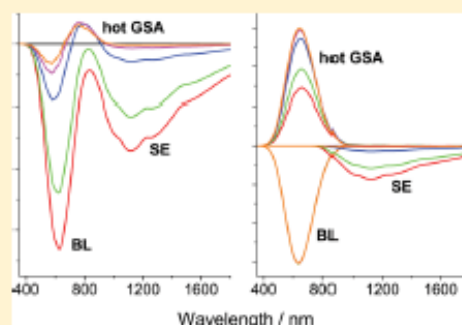
В.В. Тараканов  
25.05.2015

# Dynamics of Ground State Absorption Spectra in Donor–Acceptor Pairs with Ultrafast Charge Recombination

Roman G. Fedunov, Anastasiia V. Plotnikova, Vladimir N. Ionkin, and Anatoly I. Ivanov\*

Volograd State University, University Avenue 100, Volograd 400062, Russia

**ABSTRACT:** A theoretical approach to simulation of the transient spectra in molecular systems with ultrafast photoinduced nonradiative electronic transitions is developed. The evolution of the excited and ground state populations as well as the nonradiative transitions between them are calculated in the framework of the stochastic multichannel point-transition model involving the reorganization of the medium and the intramolecular high frequency vibrational modes. Simulations of transient spectra of donor–acceptor pairs excited in the charge-transfer band that are accompanied by ultrafast charge recombination into the ground state demonstrate a possibility of positive band appearance in the transient absorption spectrum caused by those systems in the ground state, which returned there from the excited state. The region of the parameters of the donor–acceptor systems where a positive ground state absorption signal can be observed is discussed. A qualitative comparison of the simulated transient spectra with the experimental data on betaine-30 is presented.



## I. INTRODUCTION

Photoexcitation of donor–acceptor pairs in the charge-transfer band in polar solvents, in most cases, is accompanied by ultrafast charge recombination (CR).<sup>1–10</sup> Investigations have uncovered the substantial role of nuclear nonequilibrium in ultrafast CR.<sup>9–14</sup> Indeed, in ultrafast CR the nonequilibrium initial nuclear state produced by the pump pulse relaxes in parallel with its chemical transformation, so that the reaction proceeds in a nonequilibrium regime. One of the brightest manifestations of the nonequilibrium regime is a dependence of the effective CR rate constant on the excitation pulse carrier frequency (the spectral effect).<sup>10,15–18</sup> Nonexponential kinetics of excited state population decay is another manifestation of the nonequilibrium regime.<sup>10,18</sup>

Theoretical description of ultrafast chemical transformations is usually aimed at simulation of the population kinetics that is characterized by the only parameter: the rate constant. Even a good fitting of the only parameter does not guarantee that an accepted model adequately describes other characteristics of the chemical transformation. Obviously, much more sophisticated models are required for quantitative simulation of the spectral dynamics obtained in pump–probe experiments. Indeed, the femtosecond spectroscopy provides possibilities of more detailed investigations of ultrafast dynamics of intra- and intermolecular transformations of fluorophores in solutions.<sup>19–21</sup> However, the spectroscopic data indirectly characterize the system dynamics and they can be comprehended only in the framework of certain theoretical concepts.<sup>22–24</sup>

The spectra obtained in pump–probe experiments are composed of several components.<sup>19,22,24</sup> Typically, the signals of excited state absorption (ESA), stimulated emission (SE), and bleach (BL) are considered.<sup>19</sup> Although the formal theory

of pump–probe experiments is well developed,<sup>19,22–25</sup> its application to the interpretation of ultrafast photochemical processes encounters grave difficulties caused by several reasons. A pump–probe signal of real molecular systems consists of many spectral bands corresponding to different intramolecular transitions and the number of such bands can be only guessed. Overlap of these spectral bands creates one of them. In particular, relatively weak bands can be completely invisible due to overlapping with stronger bands. To describe the time evolution of the pump–probe signal in systems with ultrafast chemical transformations, a detailed theory of such transformations is needed. Typically, an aim of chemical reaction theories is the calculation of the rate constant of corresponding reaction<sup>21,26–28</sup> whereas a description of the spectral evolution needs the time-dependent distribution function over the states of the system. This leads to one more difficulty of the theory.

A few approaches for description of the influence of the chemical transformation on the transient signals have been suggested. A theory to calculate the pump–probe spectroscopy of the curve-crossing nonadiabatic charge separation processes with harmonic potential surfaces embedded in a dielectric continuum model has been developed to treat charge separation processes in solutions with high friction.<sup>29</sup> The theory suggests the simulation of chemical transformations in terms of Zusman's stochastic approach.<sup>30</sup> This approach does not address the reorganization of high-frequency intramolecular vibrational modes that can be of primary importance in

Received: January 23, 2015

Revised: February 16, 2015

Published: February 16, 2015