


Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Институт инженерной физики и радиоэлектроники
Базовая кафедра фотоники и лазерных технологий

УТВЕРЖДАЮ
Заведующий кафедрой
 Втюрин А.Н.
« 12 » июня 2018 г.

Научно-квалификационная работа (диссертация)
Исследование эффектов резонансного неупругого рентгеновского рассеяния
многомодовых молекул

03.06.01 «Физика и астрономия»
01.04.05 «Оптика»

Научный руководитель/
руководитель _____  доктор биотехнологии (PhD) Полютов С.П.

Выпускник 21.06.18  Игнатова Н.Ю.

Красноярск 2018

Игнатова Нина Юрьевна

АННОТАЦИЯ

научно-квалификационной работы (диссертации)

**«ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТОВ РЕЗОНАНСНОГО НЕУПРУГОГО
РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЙНИЯ МНОГОМОДОВЫХ МОЛЕКУЛ»**

03.06.01 «Физика и астрономия»

01.04.05 «Оптика»

Исследования, представленные в настоящей диссертации направлены на выявление роли ядерной динамики в формировании спектров рентгеновского поглощения (XAS) и резонансного неупругого рентгеновского рассеяния (RIXS). Подход, объединяющий методы *ab initio*, для расчета электронной структуры, и метод квантового волнового пакета для динамики ядер, применен к двум системам — вода и метанол в газовом состоянии. Метод пробного поля, объединяющий накачку ИК импульсом и последующее взаимодействие с рентгеновским полем (IR-pump X-ray probe), применен для изучения спектров XAS и RIXS колебательно возбужденных молекул воды и ее изотопомеров с использованием метода двумерного волнового пакета. Нами было показано, что выделение различных начальных состояний, позволяет исследовать колебательные прогрессии в конечном состоянии, что возможно благодаря эффекту пространственной фильтрации колебаний в промежуточном остожно-возбужденном состоянии и правилам отбора. Мы также продемонстрировали возможность использования метода RIXS в качестве инструмента для исследования рентгеновского поглощения из возбужденных колебательных уровней основного состояния. Метод IR-pump X-ray probe спектроскопии, примененный к молекуле HDO, позволил выявить динамический аспект фундаментальной проблемы коллапса волновой функции. Динамика коллапса волновой функции продемонстрирована на примере постепенной эволюции начальной колебательной волновой функции основного электронного состояния, локализованной на одной из связей, OH или OD, в делокализованную колебательную функцию остожно-возбужденного состояния 2B_g . Нами детально описана динамическая природа расщепления пика состояния $1b_1$ в спектре RIXS воды и молекул изотопов HDO и BгO. Показано, что расщепление связано с близко-расположенными молекулярным и атомно-подобным резонансами. Особое внимание было акцентировано на поляризационной зависимости в спектрах RIXS молекул H₂O, HDO и D₂O.

Для того чтобы получить поперечное сечение XAS и RIXS процессов и спектры молекул с большим числом колебательных мод нами был разработан специальный теоретический подход, так называемое смешанное представление, где m мод описаны методом нестационарного волнового пакета, тогда как оставшиеся n мод учтены стационарным методом амплитуд Франка-Кондона. Этот подход объединяет преимущества метода квантового волнового пакета для расчета динамики в диссоциативном состоянии с эффективностью стационарного метода амплитуд Франка-Кондона для расчета переходов между связанными состояниями. Было показано, что многомодовая ядерная динамика играет важную роль в формировании спектров XAS и RIXS метанола. Основная причина для этого — различное колебательное уширение и динамика в основном-возбужденных состояниях с отличными поверхностями потенциальной энергии. Колебательная динамика в основном-возбужденном состоянии важна для образования протяженных многомодовых колебательных прогрессий в спектрах RIXS, которые чувствительны к отстройке падающего рентгеновского света от резонанса поглощения. Было показано, что интенсивности резонансов мягких мод спадают быстрее, по сравнению с высокочастотными модами, когда увеличивается величина отстройки и, таким образом, уменьшается длительность рассеяния. Связывание колебательных мод из-за ангармоничности и времени жизни колебательной интерференции обуславливает усложнение спектров RIXS многоатомных молекул, по сравнению с двухатомными молекулами.

ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Eckert, S., Da Cruz, V.V., Gel'Mukhanov, F., Ertan, E., Ignatova, N., Polyutov, S., Couto, R.C., Fondell, M., Dantz, M., Kennedy, B., Schmitt, T., Pietzsch, A., Odelius, M., Föhlisch, A. One-dimensional cuts through multidimensional potential-energy surfaces by tunable x rays // *Physical Review A*. Volume 97, Issue 5, 18 May 2018, 053410.

2. Ertan, E., Savchenko, V., Ignatova, N., Vaz Da Cruz, V., Couto, R.C., Eckert, S., Fondell, M., Dantz, M., Kennedy, B., Schmitt, T., Pietzsch, A., Föhlisch, A., Gel'Mukhanov, F., Odelius, M., Kimberg, V. Ultrafast dissociation features in RIXS spectra of the water molecule // *Physical Chemistry Chemical Physics*. Volume 20, Issue 21, 2018, Pages 14384-14397.

3. Savchenko, V.V., Zimin, A.A., Ignatova, N.Yu., Kimberg, V., Gel'Mukhanov, F., Polyutov, S.P. Size-dependent blinking of molecular aggregate total emission // 4th International School and Conference "Saint Petersburg OPEN 2017" on Optoelectronics, Photonics, Engineering and Nanostructures; St. Petersburg Academic University Saint-Petersburg; Russian Federation; 3 April 2017 – 6 April 2017.

4. Ignatova N., Ågren H., Zimin A., Polyutov S.P., Gel'Mukhanov F., Kimberg V., Da Cruz V.V., Couto R.C., Guimarães F.F., Ertan E., Odelius M. Infrared-pump-x-ray-probe spectroscopy of vibrationally excited molecules // *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*. 2017. T. 95. № 4. С. 042502.

5. Ignatova N., Cruz V.V., Couto R.C., Zimin A., Ågren H., Kimberg V., Gel'Mukhanov F., Polyutov S., Guimarães F.F., Ertan E., Odelius M. Gradual collapse of nuclear wave functions regulated by frequency tuned X-Ray scattering // *Scientific Reports*. 2017. T. 7. P. 43891.

6. Atuchin V.V., Kesler V.G., Zaitsev A.I., Molokeev M.S., Aleksandrovsky A.S., Kuzubov A.A., Ignatova N.Y. Electronic structure of α -SRB₄O₇: experiment and theory // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2013. T. 25. № 8. P. 085503.

7. Кузубов А.А., Краснов П.О., Игнатова Н.Ю., Федоров А.С., Томилин Ф.Н. Термодинамическая устойчивость и электронная структура полимерных “сэндвичевых” комплексов порфиринов с различными металлами // *Журнал физической химии*. 2012. Т. 86. № 10. С. 1669.

8. Зимин А.А., Игнатова Н.Ю., Чумилина Л.Г., Жереб В.П. Метод расчета краевого угла смачивания и поверхностного натяжения жидкостей путем оптимизации параметров моделирования профиля осесимметричной лежащей капли // *Актуальные проблемы авиации и космонавтики*. 2011. Т. 1. № 7. С. 137-138.

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Институт инженерной физики и радиоэлектроники
Базовая кафедра фотоники и лазерных технологий

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
Втюрин А.Н.

«20» июня 2018 г.

Научно-квалификационная работа (диссертация)

Исследование эффектов резонансного неупругого рентгеновского рассеяния
многомодовых молекул

03.06.01 «Физика и астрономия»

01.04.05 «Оптика»

Научный руководитель/
руководитель _____


доктор биотехнологии (PhD) Полютов С.П.

Выпускник

21.06.18


Игнатова Н.Ю.

Красноярск 2018