

УДК 535.34+539.19

В.А. Кузьмицкий, вед. науч. сотр., д-р физ.-мат. наук  
(КИИ МЧС Республики Беларусь, г. Минск)

## ТОЧНЫЙ АЛГЕБРАИЧЕСКИЙ МЕТОД В ОБРАТНОЙ ЗАДАЧЕ СЛОЖНОГО АНАЛОГА РЕЗОНАНСА ФЕРМИ

Обратная задача для сложного резонанса Ферми или его вибронного аналога может быть сформулирована следующим образом: восстановить матричные элементы связи «светлого» (bright) и «темных» (dark) состояний  $b_i$  и энергии невозмущенных уровней  $a_0, a_i$  ( $i=1, 2 \dots n-1$ ), считая, что из экспериментальных данных известны энергии  $e_k$  и (относительные) интенсивности переходов  $I_k$  ( $k=1, 2 \dots n$ ), ( $\sum$  ,  $n \geq 3$ ) в результирующие «перемешанные» состояния. Ранее для решения этой задачи применялся метод проб и ошибок [1] и метод функции Грина [2]. Нами разработан [3] и в настоящей работе модифицирован точный алгебраический метод решения указанной задачи, который, в отличие от [1, 2], не опирается на итерационные процедуры.

Найденный алгоритм применен для описания неадиабатического электронно-колебательного взаимодействия у трех порфириновых соединений, которое проявляется в виде сложного конгломерата линий, наблюдаемых в области электронного 0-0-перехода  $S_0 \rightarrow S_2$  спектра возбуждения (поглощения) в матрицах Шпольского при 4.2 К (число линий  $n$  составляет  $\sim 35$ ) [4, 5]; найдены энергии электронного состояния  $S_2$  и колебательных подуровней  $a_i$  состояния  $S_1$ , а также матричные элементы электронно-колебательного взаимодействия  $b_i$ . Величины последних в большинстве случаев составляют  $\sim 20-30 \text{ см}^{-1}$ . Эти значения  $b_i$  сопоставимы с данными для молекулы нафталина –  $\sim 10-20 \text{ см}^{-1}$ , полученными в работе [2], в то время как в работе [1] для этой же молекулы оцененные параметры вибронной связи в 5-10 раз больше.

### ЛИТЕРАТУРА

- 1 Wessel J., McClure D.S. // *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **58** (1980) 121.
- 2 Langhoff C.A., Robinson G.W. // *Chem. Phys.* **6** (1974) 34.
- 3 Кузьмицкий В.А. // *Оптика и спектр.* **101** (2006) 711.
- 4 Арабей С.М., Кузьмицкий В.А., Соловьев К.Н. // *Оптика и спектр.* **102** (2007) 765.
- 5 Arabei S.M., Kuzmitsky V.A., Solovyov K.N. // *Chem. Phys.* **352** (2008) 197.