

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 ~ 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.