

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 535.34.01

Опт. и спектр., 55, вып. 4, 1983

РАСЧЕТ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ИНТЕНСИВНОСТЕЙ
В СПЕКТРЕ ПОГЛОЩЕНИЯ ФЕНИЛАЦЕТИЛЕНА

М. А. Ковнер, И. Е. Крайнова и П. В. Костерин

В [1] исследован спектр поглощения из основного в первое возбужденное синглетное состояние паров фенилацетилена ($C_6H_5-C\equiv CH$) с разрешенной колебательной структурой и дано отнесение частот колебаний в возбужденном состоянии. В настоящем сообщении приведены результаты теоретического расчета относительных интенсивностей вибронных линий, соответствующих возбуждению одного полносимметричного колебания в спектре поглощения фенилацетилена. Расчет подтверждает предложенную в [1] интерпретацию. Рассмотрение проведено в рамках кондоновского приближения без учета поворота системы нормальных координат при электронном возбуждении и с учетом частотного эффекта. В этом приближении выражение для интеграла Франка—Кондона в случае возбуждения одного кванта осциллятора с номером x можно легко получить, например, с помощью [2]

$$\langle 1_x | 0 \rangle = \langle 0 | 0 \rangle \frac{2}{1 + \frac{\nu_x^g}{\nu_x^s}} \sqrt{\frac{2\pi^2 M \nu_x^g}{\hbar}} \Delta_x. \quad (1)$$

Здесь $\langle 1_x | 0 \rangle$ — интеграл Франка—Кондона, ν_x — колебательная частота, g, s — индексы основного и возбужденного состояний соответственно, Δ_x — смещение минимума адиабатического потенциала вдоль x -й нормальной координаты, M — масса осциллятора. Колебательные частоты в основном и возбужденном состояниях взяты из [1, 3, 4]. Величины Δ_x рассчитаны с помощью [5], где в рамках теории возмущений второго порядка по оператору электронно-колебательного взаимодействия получено общее выражение для адиабатиче-

Величины частот колебаний, сдвигов минимумов адиабатического потенциала Δ_x , относительных интенсивностей I_x и экспериментальные значения I_x (эксп)

x	$\nu_x^g, \text{см}^{-1}$ [14]	$\Delta_x, \text{Å}$	I_x	I_x (эксп) [1]
	0—0	—	1.0	с
1	3332	0.0008	0.0	—
2	3149	0.0084	0.0022	—
3	3130	0.0106	0.0034	—
4	3111	0.0004	0.0	—
5	2020	—0.0203	0.0078	сл.
6	1540	—0.0010	0.0	—
7	1472	—0.0135	0.0025	—
8	1199	—0.1377	0.2095	ср.
9	1047	0.1664	0.2635	сл.
10	949	—0.1878	0.3068	ср.
11	934	0.2926	0.7319	с.
12	726	—0.4510	1.3424	с.
13	409	0.1680	0.1042	ср.

ского потенциала произвольного возбужденного электронного состояния, из которого можно получить формулу для величин Δ_x . Она имеет вид

$$\Delta_x = \frac{\langle s | v_x | s \rangle - \langle g | v_x | g \rangle}{4\pi^2 M (\nu_x^s)^2}.$$

(2)

В (2) $|s\rangle, |g\rangle$ — электронные волновые функции возбужденного и основного состояний, v_x — оператор электронно-колебательного взаимодействия, который выражается производной от энергии взаимодействия электронов и ядер по x -й нормальной координате. Методику расчета матричных элементов, входящих в (2), можно найти в [2].

Расчеты проводились на ЭВМ ЕС-1022 по составленной авторами программе. Полученные результаты представлены в таблице. Как видно, существует хорошее качественное совпадение с результатами [1].

Авторы выражают благодарность М. В. Приютову за интерес к работе и ценные советы.

Литература

- [1] G. King, S. So. J. Mol. Spectr., 37, 543, 1971.
- [2] М. В. Приютов, К. И. Гурьев, Л. М. Бабков, В сб.: Исследования по нелинейной оптике и спектроскопии, вып. 1, 40. Изд. Саратовского ун-та, Саратов, 1973.
- [3] G. King, S. So. J. Mol. Spectr., 36, 468, 1970.
- [4] Л. С. Костюченко, Л. М. Свердлов, А. Ю. Слепухин. ТЭХ, 14, 390, 1977.
- [5] М. В. Приютов, Ю. В. Каменский, И. Ф. Ковалев, М. Г. Воронков. ДАН СССР, 232, 332, 1977.

Поступило в Редакцию 23 декабря 1981 г.

УДК 535.3+621.373 : 535

Опт. и спектр., 55, вып. 4, 1982

ВЛИЯНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ НЕОДНОРОДНОСТИ НА КИНЕТИКУ И СПЕКТР ИМПУЛЬСА СУПЕРИЗЛУЧЕНИЯ ПРОТЯЖЕННОЙ СИСТЕМЫ

В. Д. Лаптев

В связи с экспериментальными возможностями быстрого создания инверсии и исследования коротких импульсов излучения появились условия для обнаружения интерференционных эффектов в спонтанном излучении, обусловленных сохранением фазовой памяти системы.

Объяснение процесса спонтанного излучения при импульсной накачке, протекающего при отсутствии фазовой релаксации (т. е. суперизлучения), содержится в работах [1-9].

Авторы экспериментальных работ по наблюдению суперизлучения [1-13] объяснили в рамках полуклассической теории основные закономерности наблюдаемого импульса: временной масштаб, время задержки, осцилляции, квадратичную зависимость интенсивности от инверсии.

Вопросу о том, какова эволюция импульса излучения и его спектра при уменьшении времени релаксации посвящены работы [2]. При этом авторы работ [4, 14], в которых обсуждалась возможность реализации суперизлучения в рубине, использовали предположение о независимости физических характеристик системы, способа приготовления инверсии от пространственной координаты (пространственно-однородное приближение).

В данной работе не делается предположения о пространственной однородности распределения инверсии по длине образца, которое различно в зависимости от конкретных схем накачки.

1. В полуклассическом приближении, т. е. в пренебрежении квантовыми корреляциями между полем и атомами, система атомов описывается квантово-механически, а поле — классически.