

Теперь, чтобы определить восстановленное изображение по формуле (2) и мощность шума после восстановления по формуле (3), необходимо разумно выбрать значение оставшегося неопределенным параметра E . Легко видеть, что по мере уменьшения параметра регуляризации E винеровский фильтр приближается к инверсному и происходит улучшение качества восстановленного изображения. Однако, согласно формуле (3), одновременно с этим происходит рост случайных шумов в восстановленном изображении. Поэтому выбор параметра E необходимо делать исходя из разумного компромисса. Мы будем изучать свойства восстановленных изображений при тех значениях параметра E , при которых отношение средних статистических значений шума в восстановленном изображении к исходному не превосходит двух $\sqrt{Dn'/Dn} < 2$, где Dn — дисперсия шума до восстановления, Dn' — после восстановления.

Предполагая малость параметра E , учитываем вклад в интеграл только ближайших окрестностей корней $K(x) = \sin a(x^4 - x^2)$, разлагая синус в ряд вблизи корня

$$x_{mn} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 \pm \sqrt{1 - \frac{4m}{4n+3}}} \quad (4)$$

Интеграл (3) для мощности шума может быть вычислен приближенно. Наиболее существенный вклад дают окрестности корней $K(x) = \sin a(x^4 - x^2)$. Разлагая синус в ряд вблизи корня и суммируя по всем корням, после некоторых преобразований получим

$$I = \frac{1}{16\sqrt{2E}c^{9/2}} \left\{ \ln \frac{2\left(1 + \frac{c}{2}\right)(c^{1/2} + 2^{1/2}c^{1/4} + 1)}{(1+c)^{1/2}(c^{1/2} + 2^{1/2}c^{1/4} + 2^{1/2})^2} + 2 \operatorname{arc} \operatorname{tg} \frac{2^{1/2}c^{1/4}}{2^{1/2} - c^{1/2}} - \operatorname{arc} \operatorname{tg} \frac{2^{1/2}c^{1/4}}{1 - c^{1/2}} \right\}.$$

Здесь

$$c = \frac{k^2 r^2}{6Z} \{2(4n+3)\}^{1/2} \left(\frac{\lambda}{c_{\text{эф}}}\right)^{1/2}.$$

Согласно работе [5], задаем ряд оптимальных апертур объектива от 1.7 до $3.5 \cdot 10^{-2}$. Отношение мощности шума до фильтрации к мощности шума после фильтрации выбираем не большим $1/4$. Тогда путем несложных вычислений можно получить значение параметра E от 10^{-6} до 10^{-5} . Проведенные расчеты показывают, что после фильтрации разрешающая способность будет определяться только дифракционной ошибкой и для указанных апертур объективной линзы оказывается равной от 1.3 до 0.6 Å.

Таким образом, реконструкция при использовании фильтров типа Винера исследована нами до разрешающей способности 0.6 Å, которая соответствует апертуре объективной линзы $3.5 \cdot 10^{-2}$ рад. Как показано в работе [5], по мере увеличения апертуры объектива повышается необходимая точность дефокусировки изображения и для апертуры $3.5 \cdot 10^{-2}$ рад. она равна 20 Å, что находится на пределе ограничений, накладываемых максвелловским разбросом скоростей электронов, выходящих из катода.

Используя фильтр типа Винера, мы отфильтровали геометрические аберрации и исправили частотно-контрастную характеристику; после восстановления осталась только дифракционная ошибка. Сравнение с результатами информационной оценки разрешения, сделанной в предыдущей статье [1], показывает, что использование согласованных фильтров может дать существенный выигрыш в разрешении по сравнению с обычными линейными фильтрами.

Автор благодарит Ю. В. Воробьева за полезные обсуждения.

Литература

- [1] А. А. Вязигин. Опт. и спектр., 45, 1978.
- [2] Сб. «Обработка изображений при помощи цифровых вычислительных машин» под ред. Г. Эндрюса и Л. Инло. «Мир», М., 1973.
- [3] T. A. Welton et al. Proc. Eighth Int. Cong. El. Micr., 318, 1974.
- [4] G. W. Stroke, M. Haliowa, F. Thon, D. Willasch. Optik, 41, 319, 1974.
- [5] А. А. Вязигин. Изв. АН СССР, сер. физ., 34, 1416, 1970.

Поступило в Редакцию 7 февраля 1978 г.

УДК 535.375.5.01

К ТЕОРИИ ДИСПЕРСИИ КОЭФФИЦИЕНТОВ ДЕПОЛЯРИЗАЦИИ И ОБРАЩЕНИЯ В СПЕКТРЕ КОЛЕБАТЕЛЬНОГО КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ

В. А. Морозов

Зависимость коэффициентов деполяризации ρ и обращения P линии комбинационного рассеяния (КР) от частоты падающего света $\omega_{\text{ф}}$ (дисперсия ρ и P) обусловлена различием дисперсии симметричного и антисимметричного рассеяния. В работах [1, 2]

дисперсия ρ и P была теоретически изучена на примере колебательно-вращательного КР для компонент Q -ветви двухатомных молекул. В [1] показано, что за счет интерференционного эффекта при сложении амплитуд вероятности, соответствующих преобразованию фотона при участии состояний с квантовыми вращательными числами J_0-1 и J_0+1 (J_0 — квантовое число начального и конечного состояния молекулы), при вращательном резонансе существенную роль играет антисимметричная часть рассеяния. Ее относительный вклад особенно возрастает при возбуждении частотами ω_ϕ , попадающими между частотами переходов на подуровни J_0-1 и J_0+1 , что приводит к резонансной зависимости ρ и P от ω_ϕ . В [2] показано, что эти зависимости носят резонансный характер с максимумом между частотами переходов на подуровни J_0-1 и J_0+1 и шириной γ (γ — однородная ширина J_0-1 - и J_0+1 -подуровней). При этом в максимуме $\rho > 3/4$, $P > 1/6$ (аномальные деполяризация и обращение) и зависят от γ . При $\rho \gg 1$ и $P \gg 1$ говорят об инверсной поляризации и обращении (заметим, что часто используют такое определение коэффициента обращения P' , что $P' = P^{-1}$, однако для изучения дисперсии удобнее определение P , используемое в [2]).

В спектре колебательно-вращательного КР инверсная поляризация впервые наблюдалась в 1972 г. в работе [3] при облучении молекул гемоглобина и цитохрома C в области частот между полосами поглощения α и β , соответствующих компонентам колебательной структуры $\nu=0$ и $\nu=1$. В последующие годы было выполнено много экспериментальных работ по изучению дисперсии ρ в спектрах резонансного КР различных молекул и ионов (ссылки на основные работы см., например, в [4]). Интерес к этим исследованиям неуклонно возрастает, так как изучение дисперсии ρ дает ценные сведения, например, о симметрии молекул.

Наиболее полное изучение дисперсии ρ было проведено на молекулах порфиринов. При этом оказалось, что привлечение одних только соотношений относительно симметрии колебаний недостаточно для объяснения наблюдавшихся зависимостей $\rho(\omega_\phi)$.

В работах [5, 6] объяснение зависимости $\rho(\omega_\phi)$ было дано на основе использования простейшей модели молекулы, приводящей к дисперсии в колебательно-вращательном КР при классическом рассмотрении вращения.

Рассмотрим молекулу, у которой отличны от нуля лишь матричный элемент электронного дипольного перехода $(M_\zeta)_{00}^{00}$ и электронно-колебательного перехода $(M_\eta)_{00}^{10}$ (первый индекс характеризует электронное состояние молекулы, второй — колебательное; ξ, η, ζ — оси декартовой системы координат, жестко связанной с молекулой). Отличные от нуля матричные элементы поляризуемости $0 \rightarrow 1$ для такой молекулы при $\nu=0$ и $\nu=1$ в системе координат ξ, η, ζ имеют вид

$$\begin{aligned} (a_{\eta\zeta})_{01} &= \hbar^{-1} (M_\eta)_{01}^{10} (M_\zeta)_{00}^{00} (\omega + \Delta + i\gamma_{n0})^{-1}, \\ (a_{\zeta\eta})_{01} &= \hbar^{-1} (M_\zeta)_{01}^{10} (M_\eta)_{00}^{00} (\omega - \Delta + i\gamma_{n1})^{-1}, \end{aligned} \quad (1)$$

где $\omega \equiv \omega_\phi - \omega_{n0} - \Delta = \omega_\phi - \omega_{n1} + \Delta$, $\omega_{n1} - \omega_{n0} \equiv 2\Delta$ — интервал частот между рассматриваемыми колебательными подуровнями возбужденного электронного состояния; γ_{n0} и γ_{n1} — однородные ширины этих подуровней, которые в дальнейшем для простоты считаем равными γ .

Различие знаменателей в $(a_{\zeta\eta})_{01}$ и $(a_{\eta\zeta})_{01}$ приводит к возникновению антисимметричного рассеяния, относительная величина которого велика особенно при $|\omega| < \Delta$, т. е. при возбуждении в области частот между компонентами колебательной структуры $\nu=0$ и $\nu=1$.

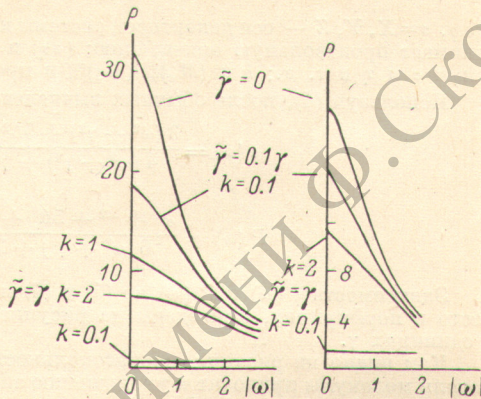
С использованием (1) в [5, 6] получено

$$\rho(\omega) = \frac{3}{4} + \frac{5}{4} \frac{\Delta^2}{\omega^2 + \gamma^2}. \quad (2)$$

В последнее время начато также систематическое экспериментальное изучение величины P в спектрах резонансного КР различных молекул и ионов [7], поэтому представляет интерес знать зависимость $P(\omega_\phi)$, предсказываемую теорией.

Для рассмотренной выше модели молекулы, используя (1) и определение P , как в [2], после обычных вычислений получаем

$$P = \frac{1}{6} + \frac{5}{6} \frac{\Delta^2}{\omega^2 + \gamma^2}. \quad (3)$$



Дисперсия коэффициентов деполяризации и обращения.

Таким образом, как и в случае вращательного резонанса при квантовом описании вращения, интерференционный эффект при сложении амплитуд рассеяния (1), соответствующих виртуальным состояниям $v=0$ и $v=1$, в области колебательного резонанса при классическом описании вращения молекулы приводит к дисперсии ρ и P .

Формула (2) передает общий ход наблюдавшихся зависимостей $\rho(\omega_\phi)$ в области $|\omega| \ll \Delta$, однако количественное сравнение, особенно для максимальных значений ρ , как отмечается в [6], приводит к расхождению. Это, по-видимому, связано с влиянием факторов, которые не учитываются в принятой простой модели рассеивающей молекулы. В [6] показано, например, что величина ρ в этой области ω очень чувствительна к действию неоднородно ушряющих возмущений.

Рассмотрим влияние на дисперсию ρ и P недиагональных элементов матрицы не-радиационного затухания подуровней $v=0$ и $v=1$: $\gamma\tilde{\gamma}_{v0, v1} = \tilde{\gamma}_{v0, v0} = \tilde{\gamma}$.

Для принятой модели молекулы с учетом $\tilde{\gamma}$ по формуле (13) работы [8] (см. также [9]) получаем

$$(\bar{a}_{\rho\sigma})_{01} = (M_\zeta)_{00}^{v0} (M_\eta)_{00}^{v1} \times \\ \times \frac{(\omega - \Delta + i\gamma)(\sigma\eta)(\rho\zeta) + (\omega + \Delta + i\gamma)(\sigma\zeta)(\rho\eta) - i\tilde{\gamma}k(\sigma\eta)(\rho\eta) - i\tilde{\gamma}k^{-1}(\sigma\zeta)(\rho\zeta)}{\hbar(\omega - \Delta + i\gamma)(\omega + \Delta + i\gamma) + \hbar\tilde{\gamma}^2} \quad (4)$$

где $\rho, \sigma = X, Y, Z$ — оси декартовой системы координат, относительно которой молекула занимает произвольную ориентацию; $(\sigma\eta)$ и т. д. — направляющие косинусы между осями σ и η и т. д.; $k \equiv (M_\eta)_{00}^{v1}/(M_\zeta)_{00}^{v0}$ и предполагается, что $\omega_{v0} \gg \Delta$.

Используя (4), после обычных вычислений получаем

$$\rho(\omega) = \frac{3(\omega^2 + \gamma^2) + 5\Delta^2 + \tilde{\gamma}^2(k^2 + k^{-2} - 1)}{4(\omega^2 + \gamma^2) + \tilde{\gamma}^2(3k^2 + 3k^{-2} + 2)}, \quad (5)$$

$$P(\omega) = \frac{\omega^2 + \gamma^2 + 5\Delta^2 + \tilde{\gamma}^2(2k^2 + 2k^{-2} + 3)}{6(\omega^2 + \gamma^2) + 2\tilde{\gamma}^2(k^2 + k^{-2} - 1)}. \quad (6)$$

Зависимости $\rho(\omega)$ и $P(\omega)$ по (5) и (6) при $\Delta = 5\gamma$, как это приблизительно имеет место в порфиринах, приведены на рисунке. По оси абсцисс отложены значения $|\omega|$ в единицах γ .

Как видно из рисунка, недиагональность матрицы затухания для рассмотренной модели молекулы приводит к уменьшению значений ρ и P в области $|\omega| \approx 0$, ослабляя тем самым зависимость ρ и P от ω .

Таким образом, при интерпретации наблюдаемых зависимостей $\rho(\omega_\phi)$ и $P(\omega_\phi)$ следует иметь в виду влияние недиагональных элементов матрицы затухания. Отметим, что это влияние, как видно из сравнения (5), (6) с результатами работы [9], может сказываться сильнее на ρ и P , чем на форме спектра поглощения.

Благодарю П. П. Шорыгина за обсуждение затронутых здесь вопросов.

Литература

- [1] В. А. Морозов. Опт. и спектр., 18, 198, 1965.
- [2] В. А. Морозов. Опт. и спектр., 19, 35, 1965.
- [3] T. G. Spigo, T. C. Streckas. Proc. Nat. Acad. Sci. USA, 69, 2622, 1972.
- [4] A. Warshel. Chem. Phys. Lett., 43, 273, 1976.
- [5] O. S. Mortensen. Chem. Phys. Lett., 30, 406, 1975.
- [6] O. S. Mortensen. Chem. Phys. Lett., 43, 576, 1976.
- [7] И. В. Александров, Н. М. Беляевская, Я. С. Бобович, А. В. Борткевич, В. Г. Маслов. ЖЭТФ, 68, 1274, 1975.
- [8] В. А. Морозов, П. П. Шорыгин. Опт. и спектр., 20, 214, 1966.
- [9] В. А. Морозов. Опт. и спектр., 21, 145, 1966.

Поступило в Редакцию 7 февраля 1978 г.

УДК 539.194

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ВЫЖИГАНИЯ ПРОВАЛОВ ДЛЯ СОПОСТАВЛЕНИЯ ВРЕМЕН РЕЛАКСАЦИЙ СОСТОЯНИЙ 0—0 И 0—1 В СИСТЕМАХ, ОСУЩЕСТВЛЯЮЩИХ ВНУТРИКОМПЛЕКСНЫЙ ФОТОПЕРЕНОС ЭЛЕКТРОНА

В. Г. Маслов

В последнее время было обнаружено явление выжигания провалов в спектрах поглощения органических соединений под действием монохроматического облучения растворов или смешанных кристаллов при гелиевых температурах [1-3]. Рядом ав-