

на выходе линейного пространственного фильтра с частотной характеристикой

$$H(u, v) = \int_T a^*(t) e^{-i \frac{u^2+v^2}{2k} z(t)} dt.$$

Описанный метод позволяет обойти трудности, с которыми приходится сталкиваться при решении аналогичной задачи традиционными методами: сложность изготовления пространственно-модулирующих транспарантов, с помощью которых осуществляется преобразование, высокие требования к юстировке и качеству оптических систем и к точности установки модулирующих фильтров и т. д. Здесь трудности переносятся на возможность осуществления требуемого закона временной модуляции светового пучка. В ряде случаев описанный метод может оказаться более эффективным.

В частности, в рамках описанной схемы может быть осуществлена согласованная пространственно-временная фильтрация; речь идет о согласовании пространственной структуры предметной волны и закона временной модуляции плоского пучка, согласовании, при котором выполняется выполненное условие

$$|F(u, v)| \sim H^*(u, v).$$

Описанная схема позволяет также записать закон временной модуляции светового пучка в виде стационарного пространственного распределения амплитуд и фаз колебаний светового поля.

Литература

- [1] A. B. Van der Lugt. IEEE Trans. Inf. Theory, 10, 139, 1964.
[2] Ю. Н. Денисюк, Д. И. Стаселько. ДАН СССР, 176, 1274, 1967.

Поступило в Редакцию 28 июля 1980 г.

УДК 539.196.4.01

ПЕРЕХОДЫ С ПОВОРОТОМ ОСЕЙ ИНЕРЦИИ В ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРАХ МНОГОАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ

М. Р. Алиев

Часто направления главных осей инерции многоатомной молекулы в различных электронных состояниях различаются. Такой поворот главных осей при электронном переходе приводит к возникновению в электронном спектре дополнительных ровибронных переходов, запрещенных в приближении жесткого волчка. Переходы этого типа, называемые также «переходами с поворотом осей», обнаружены в спектрах ацетилена и ряда трехатомных радикалов [1-4]. Теория таких переходов предложена Хоугеном и Уотсоном [1]. Ими получены формулы для сил переходов с $\Delta k=0, \pm 1, \pm 2$ в случае плоских молекул, когда поворот осей характеризуется одним углом Эйлера. Метод Хоугена и Уотсона основан на прямом вычислении углов Эйлера для поворота осей из координат атомов с использованием условий Эккарта. При этом авторы [1] ограничились нулевым приближением, в котором используются равновесные координаты атомов, так как учет нежесткости молекулы и эффектов колебательно-вращательного взаимодействия в рамках метода [1] сопряжен с определенными трудностями. Возможность применения метода [1] к более сложным молекулам также

не очевидна. В настоящем сообщении предложен общий и простой способ решения этих задач.

Рассмотрим два синглетных электронных или вибронных состояния A и B . Введем прямоугольную систему осей x, y, z , в которой тензор инерции $I_{\alpha\beta}(A)$ состояния A имеет диагональный вид, т. е. оси x, y, z являются главными осями инерции для состояния A .

Очевидно, что если главные оси инерции состояния B повернуты относительно главных осей инерции состояния A , то тензор инерции $I_{\alpha\beta}(B)$ состояния B в главных осях состояния A будет недиагональным. Поэтому вращательные гамильтонианы $H(A)$ и $H(B)$ для состояний A и B в системе главных осей состояния A можно записать в виде

$$H(A) = \sum_{\alpha} B_{\alpha\alpha} J_{\alpha}^2, \quad (1)$$

$$H(B) = \sum_{\alpha} B'_{\alpha\alpha} J_{\alpha}^2 + \sum_{\alpha \neq \beta} B'_{\alpha\beta} J_{\alpha} J_{\beta}, \quad (2)$$

где J_{α} — компоненты углового момента, $B_{\alpha\alpha}$ — вращательные постоянные состояния A , а $B'_{\alpha\alpha}$ и $B'_{\alpha\beta}$ — компоненты тензора

$$\begin{bmatrix} B'_{xx} & B'_{xy} & B'_{xz} \\ B'_{xy} & B'_{yy} & B'_{yz} \\ B'_{xz} & B'_{yz} & B'_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I'_{xx} & I'_{xy} & I'_{xz} \\ I'_{xy} & I'_{yy} & I'_{yz} \\ I'_{xz} & I'_{yz} & I'_{zz} \end{bmatrix}^{-1} \quad (3)$$

Второй член в (2) отвечает повороту главных осей при электронном переходе $B \leftarrow A$. Так как коэффициенты $B'_{\alpha\beta}$ малы по сравнению с $B'_{\alpha\alpha}$ — $B'_{\beta\beta}$ (по крайней мере в известных случаях, см. например [1-4]) оператор $H(B)$ в (2) можно привести к главным осям последовательными контактными преобразованиями,

$$\tilde{H}(B) = \dots U_n U_1 H(B) U_1^{\dagger} U_2^{\dagger} \dots = U H(B) U^{\dagger} \quad (4)$$

с чисто вращательными операторами $U_n = \exp(iS_n)$ [5]. Первое преобразование U_1 исключает из $H(B)$ второй член в первом приближении согласно уравнению

$$\tilde{H}_1(B) = \sum_{\alpha \neq \beta} B'_{\alpha\beta} J_{\alpha} J_{\beta} + i \left[S_1, \sum_{\alpha} B'_{\alpha\alpha} J_{\alpha}^2 \right] = 0, \quad (5)$$

из которого следует

$$S_1 = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma} B'_{\alpha\gamma} (B'_{\gamma\gamma} - B'_{\alpha\alpha})^{-1} e_{\alpha\beta\gamma} J_{\beta}, \quad (6)$$

где $e_{\alpha\beta\gamma}$ — единичный антисимметричный тензор третьего ранга. Операторы S_n последующих преобразований U_n также линейны относительно J_{α} , но коэффициенты в них малы по сравнению с коэффициентом в S_1 : в общем случае $S_n \sim [B'_{\alpha\gamma} (B'_{\gamma\gamma} - B'_{\alpha\alpha})^{-1}]^n J_{\beta}$. Поэтому достаточно ограничиться одним преобразованием.

Теперь рассмотрим вычисление матричных элементов дипольного момента с учетом поворота осей. Если пренебречь взаимодействием вращения с вибронным движением, то ровибронный матричный элемент оператора дипольного момента μ_z , отнесенного к неподвижной системе координат, можно записать в виде

$$\langle e'v' J'k'm' | \mu_z | evJkm \rangle = \sum_{\alpha} \langle e'v' | \mu_{\alpha} | ev \rangle \langle J'_B k'_B m'_B | \lambda_{z\alpha} | J_A k_A m_A \rangle, \quad (7)$$

где lv и Jkm — вибронные и вращательные квантовые числа соответственно, μ_{α} — компоненты молекулярного дипольного момента, $\lambda_{z\alpha}$ — направляющие косинусы. Согласно (2) и (4), функции $|J'_B k'_B m'_B \rangle$, отнесенные к главным осям состояния B , могут быть получены из функций

$|J'k'm'_A\rangle$, отнесенных к главным осям состояния A , преобразования U_1 с оператором S_1 из (6). Следовательно, вращательный матричный элемент из (7) можно записать в виде

$$\begin{aligned} & \langle J'k'm'_B | \lambda_{z\alpha} | J_A k_A m_A \rangle = \langle J'k'm' | U_1 \lambda_{z\alpha} | Jkm \rangle = \\ & = \langle J'k'm' | \left[1 - \frac{i}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma} \frac{B'_{\alpha\gamma} e_{\alpha\beta\gamma}}{(B'_{\gamma\gamma} - B'_{\alpha\alpha})} J_\beta - \frac{1}{8} \left(\sum_{\alpha\beta\gamma} \frac{B'_{\alpha\gamma} e_{\alpha\beta\gamma}}{(B'_{\gamma\gamma} - B'_{\alpha\alpha})} J_\beta \right)^2 \right] | Jkm \rangle, \quad (8) \end{aligned}$$

где теперь обе функции $|Jkm\rangle$ и $|J'k'm'\rangle$ зависят от одного набора углов Эйлера, определяющих ориентацию главных осей инерции состояния A . Поэтому вычисление матричных элементов в (8) не представляет труда. Если пренебречь центробежным искажением, то функции $|Jkm\rangle$ будут функциями жесткого волчка (для асимметричного волчка функции $|J\tau m\rangle$ получаются из $|Jkm\rangle$ ортогональным преобразованием). Однако следует отметить, что в отличие от [1] мы можем учитывать также и эффекты колебательно-вращательного взаимодействия и центробежного искажения непосредственно в (7), (8) по методике работы [6].

Для симметричных волчков или для волчков, близких к симметричному, формула (8) дает матричные элементы дипольного момента и силы для переходов с $\Delta k \leq 2$ произвольной молекулы. Полученные из (8) выражения для относительных сил переходов с $\Delta k \leq 2$ в частном случае полос типа «С» плоских молекул согласуются с соответствующими выражениями из табл. 1 работы [1]. При этом следует иметь в виду, что параметр ρ работы [1] эквивалентен (но строго не равен) величине $\rho' = -B'_{xz}/8(B'_{zz} - B'_{xx})$.

Для вычисления сил переходов с $\Delta k > 2$ следует ввести в (8) члены более высокого порядка. Однако при этом могут оказаться существенными и эффекты центробежного искажения и криолисова взаимодействия. По-видимому, такие эффекты имеют место и для переходов с $\Delta k \leq 2$, так как вычисленные по формулам работы [1] относительные интенсивности линий, как правило, 2—3 раза ниже экспериментальных.

Автор благодарен Дж. Т. Хоугену за полезное обсуждение результатов работы.

Литература

- [1] J. T. Hougen, J. K. G. Watson. *Canad. J. Phys.*, **43**, 298, 1957.
- [2] C. M. Woodman. *J. Mol. Spectr.*, **33**, 311, 1970.
- [3] J. Billingsley. *Canad. J. Phys.*, **50**, 531, 1972.
- [4] D. A. Ramsay, F. D. Waugh. *Canad. J. Phys.*, **57**, 761, 1979.
- [5] М. Р. Алиев, В. Т. Александян, *Опт. и спектр.*, **24**, 388, 1968.
- [6] М. Р. Алиев, В. М. Михайлов. *Опт. и спектр.*, **51**, 1981.

Поступило в Редакцию 6 ноября 1980 г.

УДК 535.317.1

О ВОССТАНОВЛЕНИИ КОМПЛЕКСНОЙ АМПЛИТУДЫ ПОЛЯ ОТ ОБЪЕКТА, НАБЛЮДАЕМОГО ЧЕРЕЗ ОПТИЧЕСКИ НЕОДНОРОДНУЮ СЛУЧАЙНУЮ СРЕДУ

К. Н. Свиридов и В. Н. Сидельников

Проблема восстановления комплексной амплитуды поля от объекта возникла сравнительно давно [1] в связи с трудностями непосредственной регистрации фазы принимаемого светового излучения. В теории частичной