

А. Е. О б у х о в

**РАСЧЕТ ФОТОФИЗИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ  
ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ  
С УЧЕТОМ МНОГОФОТОННЫХ ПРОЦЕССОВ  
ДЕЗАКТИВАЦИИ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОННО-  
КОЛЕБАТЕЛЬНОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ**

*Квантовохимическими методами рассчитаны квантовые выходы флуоресценции, константы скоростей излучательно-го распада, внутренней и интеркомбинационной конверсий (в триплетные состояния), сечения в каналах предельного усиления и наведенной накачкой реабсорбции. С учетом того, что в ультрафиолетовой области спектра в возбужденных многоатомных молекулах неизбежно протекают многофотонные процессы дезактивации избытка запасаемой энергии возбуждения, при оценке свойств активного элемента оптического квантового генератора требуется обязательная оценка предельной длительности переднего фронта импульса накачки.*

**Calculation of Photophysical Parameters of Heterocyclic Molecules Considering Multi-photon Processes of Deactivation of Electron-Oscillation Excitation Energy / A.Ye. Obukhov // Vestnik MGTU. Natural Sciences. 2003. № 1. P.40–53.**

Quantum-chemical methods are applied to calculate fluorescence photoresponses, constants for rates of the radiation decay, internal and intercombinational conversions (into triplet states), sections in channels of the ultimate amplification and the pumping-induced reabsorption. Taking into account that within the ultraviolet spectrum region in excited multi-atom molecules there are inevitable multi-photon processes of deactivation of the excess excitation energy being reserved, the mandatory estimation of the ultimate leading edge duration of a pumping pulse is required while examining properties of an optical quantum generator. Refs.18. Figs.5.

---

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. М е т о д ы расчета оптических квантовых генераторов. Т. 1 / Под ред. Б.И. Степанова. – Минск: Наука и техника, 1966. – 484 с.
2. С а м с о н А. М., К а т о м ц е в а Л. А., Л о й к о Н. А. Автоколебания в лазерах. – Минск.: Наука и техника, 1990. – 280 с.
3. S h a w l o w A. L., T o w n e s C. J. Infrared and optical masers // Phys. Rev. – 1958. – V. 112. – № 6. – P. 1940–1943.

4. Р у б и н о в А. Н., Т о м и н В. И. Оптические квантовые генераторы на красителях и их применение // Итоги науки и техники. Сер. Радиотехника. – 1976. – Т. 9. – С. 5–127.
5. O b u k h o v A. E. The Influence of Electronically Excited Triplet States on The Photophysical Properties of Poliatomic Heterocyclic Azoles as Laser Active Elements // Laser Physics. – 2000. – V. 7. – № 2. – P. 1101–1135.
6. O b u k h o v A. E. The Physical Principles of Simulating the Structure and Photophysical Properties of Complex Heteroaromatic Compounds by Means of the LCAO MO SCF Methods // Laser Physics. – 1997. – V. 7. – № 5. – P.1102–1131.
7. О б у х о в А. Е. Соответствие фотофизических свойств локализации и делокализации электронного возбуждения в возбужденных состояниях в рядах гетероароматических молекул // Вестник Рос. ун-та дружбы народов. Сер. физич. – 1999. – № 7. – С. 37–54.
8. О б у х о в А. Е. Наведенные накачкой фотопроцессы в молекулах и локализация спин-орбитального взаимодействия в возбужденных синглетных и триплетных состояниях // Труды 1-го Евразийского конгресса по медицинской физике (М., МГУ им. Ломоносова, 18–22 июня 2001 г.): Медицинская физика. – 2001. – Т. 11. – С. 81–82.
9. O b u k h o v A. E. Photoprocesses in the Series of the N, O, S-Heterocyclic UV-Laser Active Molecules // Вестник Рос. ун-та дружбы народов. Сер. физич. – 1998. – С. 76–84.
10. О б у х о в А. Е. Фотопроцессы, строение, структура возбужденных электронных состояний в рядах сложных гетероароматических молекул // Изв. РАН. Сер. физич. – 1992. – Т. 56. – № 9. – С. 210–224.
11. О б у х о в А. Е. Возбужденные электронные состояния и генерация излучения в рядах сложных многоатомных молекул // Квантовая электроника. – 1992. – Т. 19. – № 12. – С. 1164–1171.
12. О б у х о в А. Е. Возбужденные состояния, строение и генерация ультрафиолетового излучения в рядах сложных молекул // Оптика и спектроскопия. – 1993. – Т. 74. – № 2. – С. 257–265.
13. O b u k h o v A. E. Excited states, generation of light and photoprocesses in series complex N, O, S polyatomic molecules // Proceeding of SPIE. – 1994. – V. 2370. – P. 268–273.
14. O b u k h o v A. E. Excited electronic states and of complex geteroaromatic molecules in series and in different aggregation of the matter // Proceeding of SPIE. – 1994. – V. 2370. – P. 274–278.
15. О б у х о в А. Е. Фотопроцессы, строение, эволюция свойств возбужденных электронных состояний и переходов в рядах сложных гетероароматических молекул // Физическая мысль России. – 1996. – Т. 1. – С. 6–22.
16. O b u k h o v A. E. Photoprocesses: Evolution of the Properties of Excited States and Transitions in Series of Laser-Active N, O, S Heterocyclic Molecules; and the Influence of Conditions // Laser Physics. – 1996. – V. 6. – No. 5. – P. 890–905.
17. О б у х о в А. Е. Возбужденные состояния, фотофизические свойства и структура переходов сложной молекулы 1,4-фенилен-2,2'-бисоксазола // Квантовая электроника. – 1993. – Т. 20. – № 9. – С. 863–873.
18. O b u k h o v A. E. Regularities of Variation in Spectral-Fluorescence Properties and the Nature of Intramolecular Interaction in N, O, S Series of Heterocyclic Azoles in the UV Range of Optical Spectrum // Laser Physics. – 1999. – V. 9. – No. 3. – P. 699–722.

Статья поступила в редакцию 9.04.2002

Александр Евгеньевич Обухов родился в 1953 г., окончил в 1976 г. Московский энергетический институт. Канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник Российского университета дружбы народов. Автор более 75 научных работ в области спектроскопии многоатомных систем, квантовой химии, оптики и лазерной физики, физической органической химии.

A.Ye. Obukhov (b. 1953) graduated from the Moscow Energy Institute in 1976. Ph.D. (Phys.-Math.), senior researcher of the Russian University for Friendship of Peoples. Author of 75 publications in the field of spectroscopy of multi-atom systems, quantum chemistry, optics and laser physics, physical organic chemistry.