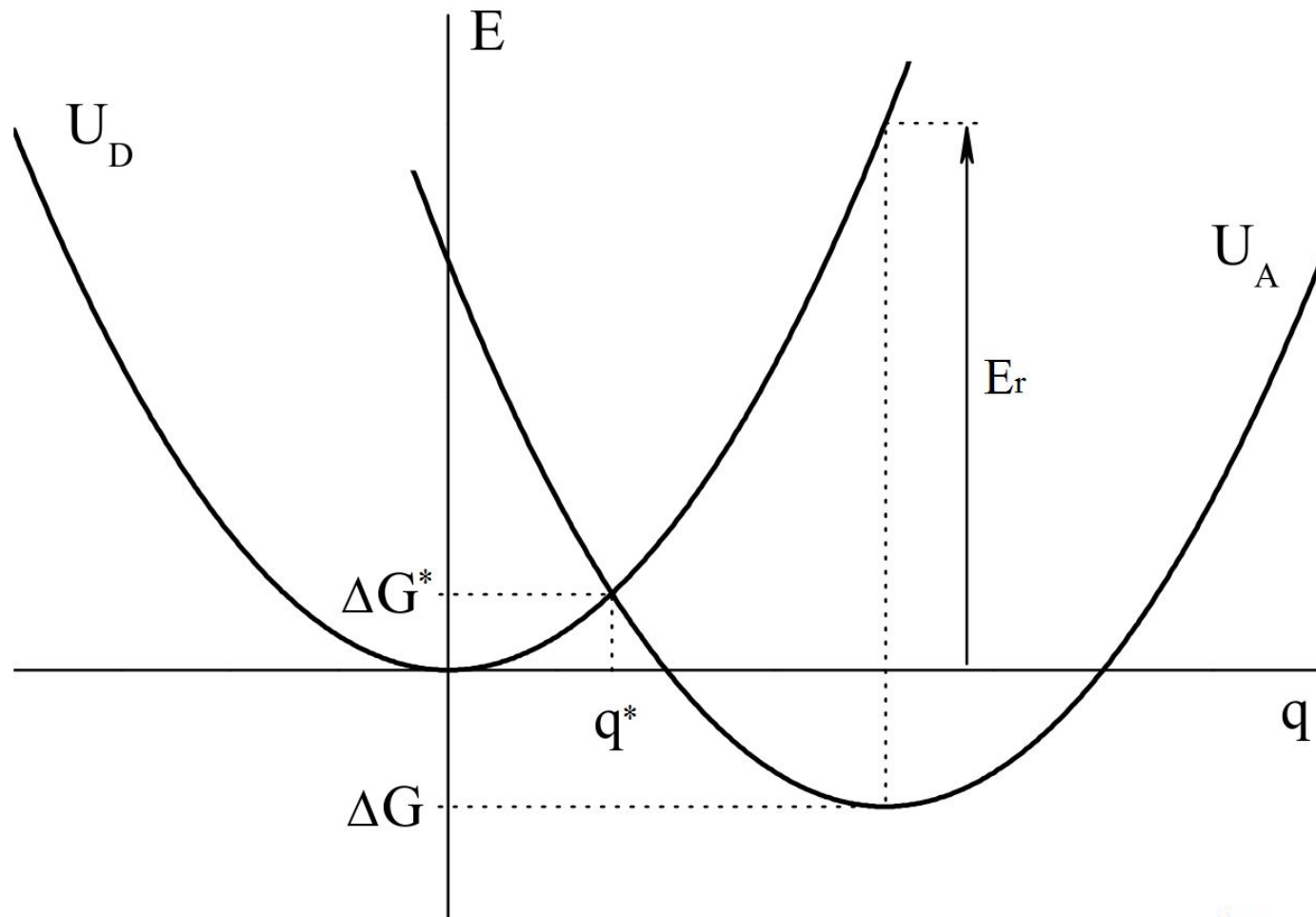


«Волгоградский государственный университет»
Институт математики и информационных технологий
Кафедра теоретической физики и волновых процессов

large Магистерская диссертационная работа по теме
**Многомерный фиттинг спектров нестационарной
флюоресценции с учетом релаксации высокочастотной
колебательной моды**

Направление: 03.04.02 - Физика. Компьютерная физика

Ермоленко И.П.



$$i \frac{d\rho(t)}{dt} = [H, \rho(t)]$$

$$H = \begin{pmatrix} H_1 & V(t) \\ V^*(t) & H_2 \end{pmatrix}$$

$$H_i = T + U_i$$

$$T = \frac{1}{2} \sum p_\alpha^2$$

$$U_1 = \frac{1}{2} \sum \omega_\alpha^2 q_\alpha^2$$

$$U_2 = \frac{1}{2} \sum \omega_\alpha^2 (q_\alpha - q_{\alpha 0})^2 + \Delta G$$

$$V(t) = V_0 \exp(i\omega_e t - t^2/\tau_e^2)$$

$$\rho_{11}(y_1, t) = \sum_{\{\vec{n}\}} \int_{-\infty}^t d\xi \varphi(y_1, t, \xi, \vec{n}),$$

где

$$\varphi(y_1, t, \xi, \vec{n}) = Z^{-1} F(\vec{n}, \vec{0}) \exp \left\{ -\frac{y_1(t - \xi)^2}{4E_r kT} - \frac{2\xi^2}{\tau_e^2} - \frac{\delta\omega_e(t - \xi, \vec{n})^2}{2\sigma_e(t - \xi)^2} \right\}$$

и $y_1(t) = y_1 - 2E_r \tilde{Q}(t)$, $\delta\omega_e(t, \vec{n}) = \omega_e + \Delta G - E_r - \sum_{\gamma} n_{\gamma} \Omega_{\gamma} - y_1(t) \tilde{Q}(t)$, $\sigma_e(t)^2 = 2E_r k_B T + \tau_e^{-2} - 2E_r k_B T \tilde{Q}(t)^2$, $\tilde{Q}(t) = Q(t)(2E_r)^{-1}$ нормализованная функция релаксации растворителя.

$$I(\omega_p, t) = Z^{-1} \sum_{\{\vec{m}\}} F(0, \vec{m}) \Phi_2(\omega_p, t, \vec{m}),$$

$$\Phi_2(\omega_p, t, \vec{m}) = \int_{-\infty}^t d\xi \exp \left\{ -\frac{\omega_p(t - \xi, \vec{m})^2}{2E_r k_B T} - \frac{2\xi^2}{\tau_e^2} - \frac{\delta\omega_{e,p}(t - \xi, \vec{m})^2}{2\sigma_e(t - \xi)^2} \right\},$$

$$\omega_p(t, \vec{m}) = \omega_p + E_r + \Delta G - \sum_{\gamma} m_{\gamma} \Omega_{\gamma} - 2E_r Q(t),$$

$$\delta\omega_{e,p}(t, \vec{m}) = \omega_e + \Delta G - E_r - \left(\omega_p + E_r + \Delta G - \sum_{\gamma} m_{\gamma} \Omega_{\gamma} \right) Q(t).$$

$$A(\omega)_e = a\omega^3 \cdot \sum_n \left\{ \frac{S^n e^{-S}}{n!} \exp \left[\frac{-(-|\Delta G| + E_{rm} + n\Omega + \omega)^2}{4E_{rm}kT} \right] \right\}$$

$$A(\omega)_a = a\omega \cdot \sum_n \left\{ \frac{S^n e^{-S}}{n!} \exp \left[\frac{-(|\Delta G| + E_{rm} + n\Omega - \omega)^2}{4E_{rm}kT} \right] \right\}$$

$$S = \frac{-E_{rv}}{\Omega}$$

