

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ЗАСЕЛЁННОСТИ “ТЁМНЫХ” СОСТОЯНИЙ ТРЁХУРОВНЕВОЙ МОЛЕКУЛЫ ПРИ ФОТОИЗОМЕРИЗАЦИИ

**В.А. Морозов<sup>\*</sup>, Ю.М. Дубина<sup>\*\*</sup>**

*\* Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва*

*\*\* Институт проблем управления РАН, Москва*

Приводятся результаты описания некоторых характерных особенностей процесса фотоизомеризации многоатомных молекул и соответствующие изменения во времени поля облучения и вторичного излучения на основе математического моделирования динамики заселённости изомерных состояний молекулы с использованием трёхуровневой системы V-конфигурации в предположении, что возбуждённые собственные состояния молекулы вырождены, связаны изомер-изомерным внутримолекулярным взаимодействием, и одно из них является излучательным. Рассмотрены случаи облучения коротким (по отношению ко времени жизни возбуждённого состояния соответствующей двухуровневой молекулы при спонтанном излучении) синусоидальным, а также длительным прямоугольным импульсом облучения. Динамика заселённости состояний описана на основе решений уравнения Лиувилля для оператора плотности молекулы при феноменологическом учёте затухания её возбуждённых состояний и на основе решений управляющего уравнения общей теории релаксации в форме Линдблада – при описании динамики соответствующих суперпозиционных невырожденных, коллективно распадающихся состояний молекулы, “развязанных” относительно изомер-изомерного взаимодействия. Приводятся примеры динамики заселённости состояний, которая характеризуется много меньшей скоростью рассеяния светового импульса и послесвечения по сравнению со скоростью рассеяния и послесвечения соответствующей двухуровневой молекулы, т.е. примеры динамики заселённости так называемых “тёмных” состояний.