

Содержание

1. Введение (1034).
2. Экситон Френкеля. Элементарная модель электронно-возбужденных состояний агрегированных молекул (1038).
 - 2.1. Молекулярный димер.
 - 2.2. Частные случаи взаимного расположения дипольных моментов перехода молекул в димере.
 - 2.3. Линейная периодическая цепочка из N молекул.
 - 2.4. Частные случаи взаимного расположения дипольных моментов перехода молекул в цепочке.
 - 2.5. Правила отбора для поглощения света молекулярной цепочкой. Простейшая интерпретация J- и H-полосы.
3. Неканонические экситонные теории формы оптических полос молекулярных агрегатов (1043).
 - 3.1. Полуклассическая модель.
 - 3.2. Вибронная модель.
4. Каноническая экситонная теория формы оптических полос молекулярных агрегатов (1050).
 - 4.1. Общие сведения об агрегатах красителей и сравнительная характеристика методов расчета их оптических полос.
 - 4.2. Описание модели: гамильтонианы молекулы и молекулярного агрегата, взаимодействие с излучением.
 - 4.3. О форме полосы поглощения в приближении теории возмущений.
 - 4.4. Форма полосы поглощения в приближениях средней t -матрицы и когерентных потенциалов.
 - 4.5. Численное моделирование формы оптических полос агрегатов.

В.В. Егоров, М.В. Алфимов. Центр фотохимии РАН,
119421 Москва, ул. Новаторов 7а, Российская Федерация
Тел. (495) 936-77-53. Факс (495) 936-12-55
E-mail: egorov@photonics.ru, alfimov@photonics.ru

*Статья поступила 15 декабря 2006 г.,
после доработки 24 апреля 2007 г.*

5. Экситонная теория: высокоэффективные аналитические методы в численном моделировании формы полос (1057).
 - 5.1. Гауссов диагональный беспорядок.
 - 5.2. Коррелированный гауссов беспорядок.
 - 5.3. О методе расчета с использованием представления формы полосы через резольвенту гамильтониана.
 - 5.4. Результаты расчетов.
 - 5.5. О методе расчета для агрегатов с произвольным диагональным беспорядком. Результаты расчетов.
6. Достоинства и недостатки канонической экситонной теории J-полосы (1061).
7. Динамика элементарного возбуждения протяженной электронной системы как альтернатива экситонному подходу (1062).
8. Идеальное полиметиновое состояние. Моделирование оптического перехода фотопереносом электрона (1062).
9. Стандартная теория элементарных процессов переноса электронного заряда: классическое движение реорганизации ядер среды. Проблема динамики переходного состояния (1063).
10. Микроскопическая теория фотоиндуцированного переноса электрона (1064).
 - 10.1. Учет квантового характера реорганизации ядер.
 - 10.2. Аналитический результат для оптического поглощения.
 - 10.3. Переход к стандартному результату.
11. Физика элементарного переноса заряда (1066).
 - 11.1. Простейший пример: потенциальный ящик с подвижной стенкой.
 - 11.2. Динамическая накачка переноса электрона диссипативной реорганизацией окружающей среды. Динамические резонансы-инварианты для переходного состояния: трансферон и диссипон.
12. Обужение движением Андерсона – Кубо и трансферонный резонанс: сходство и отличие (1069).
13. Примеры применения новой теории переноса заряда для объяснения фундаментальных экспериментальных данных (1070).
 - 13.1. Несостоятельность применения стандартной теории пере-