

РАСЧЕТ РАДИАЦИОННЫХ ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕКТРОННОГО ПЕРЕХОДА $B^1\Pi-X^1\Sigma^+$ МОЛЕКУЛЫ KRb**А.Д. Смирнов**МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация
e-mail: adsmir@mail.ru

Проведен расчет радиационных параметров (коэффициентов Эйнштейна спонтанного излучения, сил осциллятора для поглощения, факторов Франка–Кондона, волновых чисел вращательных линий в системе полос $B^1\Pi-X^1\Sigma^+$ молекулы KRb ($0 \leq v' \leq 12$, $0 \leq v'' \leq 30$, $j' = 0, 20, 41, 50, 70, 100$)) и радиационного времени жизни возбужденного электронного состояния. Расчеты выполнены на основе полуэмпирических потенциальных кривых, построенных в настоящей работе. Колебательные энергии и волновые функции найдены в результате численного решения радиального волнового уравнения.

Ключевые слова: потенциальная кривая, радиальное волновое уравнение, коэффициенты Эйнштейна, силы осциллятора, радиационное время жизни возбужденного состояния, факторы Франка–Кондона.

CALCULATION OF RADIATIVE PARAMETERS FOR $B^1\Pi-X^1\Sigma^+$ ELECTRON TRANSITION OF KRb MOLECULE**A.D. Smirnov**Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation
e-mail: adsmir@mail.ru

The paper presents calculation of radiative parameters (Einstein coefficients of spontaneous radiation, oscillator strengths for absorption, Franck–Condon factors, wave numbers of rotational lines in the system of bands $B^1\Pi-X^1\Sigma^+$ of KRb molecule ($0 \leq v' \leq 12$, $0 \leq v'' \leq 30$, $j' = 0, 20, 41, 50, 70, 100$)) and radiative lifetime of the excited electronic state. The calculations are performed on the basis of semi empirical potential energy curves built in the current paper. Both vibrational energies and wave functions are found as a result of a numerical solution of the radial wave equation.

Keywords: potential energy curve, radial wave equation, Einstein coefficients, oscillator strengths, radiative lifetime of excited state, Franck–Condon factors.

За последние годы значительно выросло число экспериментальных и теоретических исследований, связанных с получением гомо- и гетероядерных димеров щелочных металлов в основных и возбужденных электронных состояниях с помощью спектральной методики фотоассоциации холодных атомов [1, 2]. Важность этих исследований вызвана изучением динамики столкновения холодных частиц, проведением химических реакций при низких температурах. Для синтеза холодных молекул необходимы надежные данные о молекулярных постоянных, потенциальных кривых и радиационном времени жизни электронных состояний молекул [3].

Спектроскопические постоянные для основных электронных состояний гомоядерных (Li_2 , Na_2 , K_2 , Rb_2 , Cs_2) и гетероядерных (NaLi , NaK , NaRb , NaCs , KRb , RbCs , CsK , CsLi , RbLi) димеров атомов щелочных металлов и молекулярных ионов (Li_2^+ , Li_2^- , Na_2^+ , K_2^+ , Cs_2^+) были рассчитаны в работах [4–10], для возбужденных электронных состояний гомоядерных димеров щелочных металлов — в работах [11–15]. Расчеты проводились квантово-химическим методом на основе полуэмпирических потенциальных кривых. Радиационные параметры для димеров лития, натрия, калия, рубидия и цезия определены в работах [11, 16–18]. Сравнение результатов расчета спектроскопических постоянных и радиационных параметров с экспериментальными данными показало эффективность метода расчета. В настоящей работе аналогичный метод применен для расчета спектроскопических постоянных и радиационных параметров электронного перехода $B^1\Pi - X^1\Sigma^+$ молекулы $^{39}\text{K}^{85}\text{Rb}$. Система полос $B^1\Pi - X^1\Sigma^+$ молекулы KRb расположена в спектральной области $14\,400 \dots 15\,650 \text{ см}^{-1}$. Экспериментальные исследования выполнены с использованием лазерных методик и спектральной техники высокого разрешения [19–21]. Были получены колебательные и вращательные постоянные, необходимые для построения полуэмпирических потенциальных кривых основного и возбужденного состояний.

Построение потенциальных кривых. Для построения потенциальной кривой основного состояния использована сложная модель, состоящая из нескольких функций, хорошо описывающих различные участки потенциальной кривой. Нижний участок потенциальной кривой аппроксимирован функцией возмущенного осциллятора Морзе (ВМ) $U(R) = V_e(y^2 + \sum_{n=4}^{\infty} b_n y^n)$, где $y = 1 - \exp[-\rho(R - R_e)]$; R, R_e — межъядерное расстояние и равновесное межъядерное расстояние; V_e, ρ, b_n — параметры потенциальной функции ВМ.

В средней части потенциальной кривой, которая представляет собой экспериментально исследованный диапазон колебательных квантовых чисел, использовался потенциал Ридберга–Клейна–Риса (РКР). Потенциальная кривая РКР не имеет аналитического вида, она строится в виде набора классических поворотных точек R_{\max} и R_{\min} для экспериментально изученных колебательных уровней энергии. При больших расстояниях между ядрами атомов применена функция

$$U(R) = D_e - \sum \frac{C_n}{R^n} - \Delta U_{\text{обм}}(R), \quad (1)$$

где D_e — экспериментальная энергия диссоциации; C_n — параметры функции, $n = 6, 8, 10, 12$; $\Delta U_{\text{обм}}(R)$ — потенциал обменного взаимодействия атомов. Для аппроксимации области потенциальной кривой,

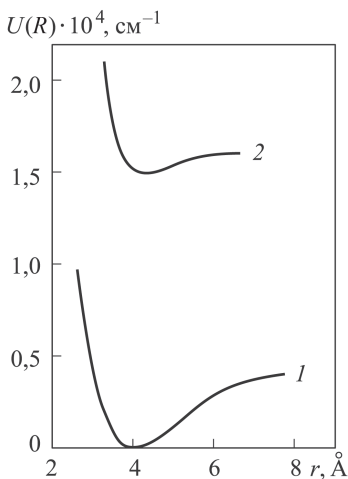


Рис. 1. Потенциальные кривые для основного $X^1\Sigma^+$ (1) и возбужденного $B^1\Pi$ (2) электронных состояний молекулы KRb

и возбужденного состояний (функций ВМ, РКР и (1)) гладко сшивались в единую кривую. Интерполяция потенциальных кривых РКР между поворотными точками проводилась кубическими сплайнами. Потенциальные кривые для основного и возбужденного состояний, построенные по рассчитанным параметрам, приведены на рис. 1.

Для проверки надежности построенных потенциальных кривых на их основе были вычислены колебательные энергии, вращательные и центробежные постоянные. Колебательные энергии найдены путем численного решения радиального волнового уравнения на основе потенциальных кривых, построенных в настоящей работе. Вращательные и центробежные постоянные для основного и возбужденного состояний были определены по выражениям, полученным с помощью теории возмущений для модели вращающего осциллятора двухатомной молекулы [21]:

$$B_v = \beta \langle v | R^{-2} | v \rangle; \quad D_v = \beta^2 \sum_{u \neq v} \frac{\langle u | R^{-2} | v \rangle^2}{(E_u - E_v)^2};$$

$$H_v = \beta^3 \sum_{t \neq v} \sum_{u \neq v} \frac{\langle v | R^{-2} | u \rangle \langle u | R^{-2} | t \rangle \langle t | R^{-2} | v \rangle}{(E_u - E_v)(E_t - E_v)} - \beta^2 B_v \sum_{u \neq v} \frac{\langle u | R^{-2} | v \rangle^2}{(E_u - E_v)^2}.$$

Здесь $\langle u | R^{-2} | v \rangle = \int_0^\infty \psi_u(R) R^{-2} \psi_v(R) dR$ — матричный элемент. Рассчитанные и экспериментальные значения колебательных энергий и

прилегающей к диссоциационному пределу молекулы, применялся потенциал обменного взаимодействия

$$\Delta U_{\text{обм}}(R) = BR^\alpha \exp(-\beta R), \quad (2)$$

где B , α , β — параметры потенциала.

Полный набор параметров функций ВМ, РКР, (1) и (2) для основного электронного состояния молекулы KRb приведен в работе [8]. Для возбужденного состояния также рассчитаны параметры для функций ВМ, РКР и (1). Поворотные точки кривой РКР электронного состояния $B^1\Pi$ определены для колебательных квантовых чисел $v = 0 \dots 15$. Различные участки потенциальных кривых для основного

вращательных постоянных для основного и возбужденного состояний молекулы KRb приведены в табл. 1.

Таблица 1

Рассчитанные и экспериментальные значения колебательных энергий и вращательных постоянных, см⁻¹, для основного и возбужденного состояний молекулы KRb

$X^1\Sigma^+$					$B^1\Pi$				
v	E_v^o	$\delta E_v \cdot 10^3$	$B_v^o \cdot 10^2$	$\delta B_v \cdot 10^5$	v	E_v^o	$\delta E_v \cdot 10^3$	$B_v'^o \cdot 10^2$	$\delta B_v \cdot 10^5$
0	37,848	0	3,809	0	0	30,548	-6	3,285	-1
5	410,112	0	3,745	0	1	91,390	-15	3,275	-1
10	770,526	1	3,679	0	2	151,810	-19	3,263	0
15	1118,702	1	3,608	0	3	211,777	-17	3,249	0
20	1454,165	0	3,531	0	4	271,232	-9	3,232	0
25	1776,342	0	3,447	1	5	330,094	8	3,214	-1
30	2084,542	1	3,357	0	6	388,257	-34	3,193	-1
35	2377,940	1	3,257	0	7	445,590	70	3,170	-1
40	2655,557	1	3,148	0	8	501,935	118	3,145	-1
45	2916,237	0	3,026	0	9	557,113	178	3,118	-2
50	3158,619	1	2,890	0	10	610,919	248	3,088	-2
55	3381,109	6	2,737	0	11	663,121	325	3,056	-3
60	3581,849	17	2,563	1	12	713,465	402	3,022	-3

$$\delta E_v = E_v^o - E_v^p; \delta B_v = B_v'^o - B_v^p.$$

Рассчитанные на основе потенциальных кривых значения колебательных энергий, вращательные и центробежные постоянные были аппроксимированы степенными функциями, параметры которых являются спектроскопическими молекулярными постоянными:

$$\begin{aligned} E_v &= \omega_e(v + 0,5) - \omega_e x_e(v + 0,5)^2 + \dots; \\ B_v &= B_e - \alpha_e(v + 0,5) + \gamma_e(v + 0,5)^2 + \dots; \\ D_v &= D_e - \beta_e(v + 0,5) + \delta_e(v + 0,5)^2 + \dots; \\ H_v &= H_e - \xi_e(v + 0,5) + \epsilon_e(v + 0,5)^2 + \dots \end{aligned}$$

Вычисленные значения спектроскопических постоянных, полученные из оптимальных аппроксимирующих функций, экспериментальные значения для основного и возбужденного состояний молекулы KRb приведены в табл. 2. Экспериментальные и рассчитанные значения частоты колебаний отличаются на 0,005 ($X^1\Sigma^+$) и 0,001 % ($B^1\Pi$),

**Сравнение результатов расчета молекулярных постоянных, см⁻¹,
с экспериментальными данными**

Молекулярные постоянные	$B^1\Pi$	$X^1\Sigma^+$
ω_e	61,262/61,256	75,846/75,842
$\omega_e x_e$	0,2116/0,2089	0,230/0,230
$\omega_e y_e$	2,89(-3)/2,87(-3)	-3,7(-4)/-3,9(-4)
$\omega_e z_e$	-1,037(-4)/-1,031(-4)	-3,7(-6)/-3,1(-6)
B_e	0,03289/0,03288	0,03815/0,03813
α_e	7,62(-5)/7,41(-5)	1,21(-4)/1,20(-4)
γ_e	-1,11(-5)/-1,13(-5)	-7,3(-7)/-7,4(-7)
D_e	3,78(-8)/3,79(-8)*	3,85(-8)/3,86(-8)*
H_e	5,4(-14)/5,7(-14)**	3,7(-14)/3,7(-14)**

В числителе приведены значения, рассчитанные на основе эмпирических потенциальных кривых, в знаменателе — экспериментальные данные.

* и ** — центробежные постоянные D_e и H_e , вычисленные с использованием экспериментальных данных по эмпирическим выражениям Кратцера и Кэмбла.

значения вращательных постоянных — на 0,03 и 0,05 %. Значения центробежных постоянных (см. табл. 2) определяются по выражению Кратцера [22]

$$D_e = \frac{4B_e^3}{\omega_e^2} \quad (3)$$

и выражению Кэмбла [23]

$$H_e = \frac{2D_e(12B_e^2 - \alpha_e\omega_e)}{3\omega_e^2}. \quad (4)$$

Значения D_e и H_e , рассчитанные по соотношениям (3) и (4) (см. табл. 2), отличаются от значений, полученных с помощью потенциальных кривых на 0,3 и 5 % соответственно.

Расчет радиационных параметров. Расчет радиационных параметров для перехода $B^1\Pi - X^1\Sigma^+$ проведен на основе построенных эмпирических потенциальных кривых. Для электронного колебательно-вращательного перехода двухатомной молекулы коэффициент Эйнштейна для спонтанного излучения $A_{v'',j''}^{v',j'}$, с⁻¹, и сила осциллятора для поглощения $(f_{v'',j''}^{v',j'})_{\text{погл}}$ (безразмерная величина), связаны с зависимостью дипольного момента электронного перехода от межъядерного расстояния $R_e(r)$ и определяются по выражениям [24]:

$$A_{v'',j''}^{v',j'} = 2,026 \cdot 10^{-6} \frac{(\nu_{v'',j''}^{v',j'})^3 (2 - \delta_{0,\Lambda'+\Lambda''})}{(2 - \delta_{0,\Lambda''})} \times \\ \times [\langle \psi_{v',j'}(r) | R_e(r) | \psi_{v'',j''}(r) \rangle]^2 \frac{S_{j',j''}}{2j'+1}; \quad (5)$$

$$(f_{v'',j''}^{v',j'})_{\text{погл}} = 3,0376 \cdot 10^{-6} \frac{\nu_{v'',j''}^{v',j'} (2 - \delta_{0,\Lambda'+\Lambda''})}{(2 - \delta_{0,\Lambda''})} \times \\ \times [\langle \psi_{v',j'}(r) | R_e(r) | \psi_{v'',j''}(r) \rangle]^2 \frac{S_{j',j''}}{2j'' + 1}. \quad (6)$$

Здесь $\delta_{0,\Lambda}$ — символ Кронекера; $\nu_{v'',j''}^{v',j'}$ — волновое число вращательной линии электронного перехода, см^{-1} ; $\psi_{v',j'}(r)$, $\psi_{v'',j''}(r)$ — колебательно-вращательные волновые функции возбужденного и основного электронных состояний; $S_{j',j''}$ — фактор Хенля–Лондона; $R_e(r)$ — зависимость дипольного момента электронного перехода от межъядерного расстояния, а.е.

Волновые числа вращательных линий электронного перехода были рассчитаны по соотношению

$$\nu_{v'',j''}^{v',j'} = T'_e + E'_{vj} - E''_{vj}, \quad (7)$$

где T'_e — электронная энергия возбужденного состояния; E'_{vj} , E''_{vj} — колебательно-вращательные энергии электронных состояний. При расчете волновых чисел вращательных линий использовались значения $T'_e(B^1\Pi)$, взятые из работ [19, 20]. Величины $E'(v, j)$, $E''(v, j)$ и соответствующие им волновые функции $\psi_{v',j'}(r)$, $\psi_{v'',j''}(r)$ получены в результате численного решения радиального волнового уравнения с использованием эффективного потенциала

$$U^{\text{эф}}(r) = U(r) + \frac{h}{8\pi^2\mu c} \frac{j(j+1)}{r^2}, \quad (8)$$

где μ — приведенная масса молекулы.

Важными радиационными характеристиками электронного перехода являются факторы Франка–Кондона $q_{v'',j''}^{v',j'}$ (ФФК), которые определяют относительную вероятность электронного перехода. Для вращательной линии ФФК описывается соотношением

$$q_{v',j',v'',j''} = \langle \psi_{v',j'}(r) | \psi_{v'',j''}(r) \rangle^2 = \left| \int_0^\infty \psi_{v',j'}(r) \psi_{v'',j''}(r) dr \right|^2. \quad (9)$$

Время жизни возбужденных состояний электронных переходов рассчитано с использованием полученных коэффициентов Эйнштейна

$$\tau_{v',j'} = \left(\sum_{v''=0} A_{v'',j''}^{v',j'} \right)^{-1}. \quad (10)$$

Расчет коэффициентов $A_{v'',j''}^{v',j'}$, $(f_{v'',j''}^{v',j'})_{\text{погл}}$, $q_{v'',j''}^{v',j'}$, $\nu_{v'',j''}^{v',j'}$ и $\tau_{v',j'}$ проведен по соотношениям (5)–(10). При расчете значений $A_{v'',j''}^{v',j'}$ и $(f_{v'',j''}^{v',j'})_{\text{погл}}$ была использована экспериментальная зависимость дипольного момента от межъядерного расстояния $R_e(r)$ для электронного перехода $B^1\Pi - X^1\Sigma^+$, полученная в работе [20].

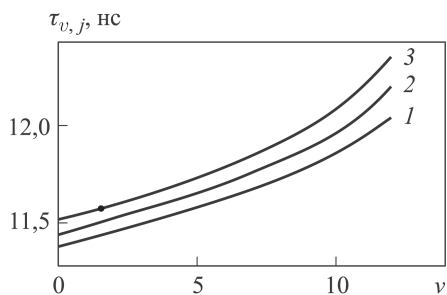


Рис. 2. Радиационное время жизни электронного состояния $B^1\Pi$ молекулы KRb при $j = 0$ (1), 50 (2) и 100 (3), точкой обозначено экспериментальное значение

Рассчитаны радиационные параметры для электронного перехода $B^1\Pi - X^1\Sigma^+$ молекулы KRb ($0 \leq v' \leq 12$, $j' = 0, 20, 41, 50, 70, 80, 100$; $0 \leq v'' \leq 30$), а также радиационное время жизни для возбужденного электронного состояния. Вследствие громоздкости рассчитанных массивов радиационных параметров $A_{v',v''}$, $f_{v',v''}^{\text{погл}}$, $q_{v',v''}$, $r_{v',v''}$ в настоящей работе приведена часть полученных результатов. Рассчитанные значения радиационных параметров перехода для электронно-колебательных полос ($0 \leq v' \leq 5$; $0 \leq v'' \leq 8$; $j' = 0$) представлены в табл. 3. Результаты расчета радиационного времени жизни для молекулы KRb ($0 \leq v' \leq 12$; $j' = 0, 50, 100$) приведены на рис. 2.

Таблица 3

Рассчитанные значения радиационных параметров перехода $B^1\Pi - X^1\Sigma^+$ молекулы KRb ($j = 0$)

v'	v''								
	0	1	2	3	4	5	6	7	8
0	0,0728	0,1987	0,2638	0,2259	0,1396	0,0658	0,0244	0,0245	0,0018
	6,67(+6)	1,79(+7)	2,33(+7)	1,97(+7)	1,20(+7)	5,56(+6)	2,04(+6)	6,01(+5)	1,44(+5)
	7,03(-4)	1,20(-1)	1,58(-1)	1,35(-1)	8,30(-2)	3,89(-2)	1,44(-2)	4,29(-3)	1,04(-3)
	15005,2	14929,8	14854,9	14780,4	14706,4	14632,9	14559,9	14487,3	14415,2
1	0,1832	0,1903	0,0329	0,0193	0,1299	0,1837	0,1433	0,0761	0,0299
	1,69(+7)	1,73(+7)	2,94(+6)	1,70(+6)	1,12(+7)	1,57(+7)	1,20(+7)	6,30(+6)	2,44(+6)
	1,11(-1)	1,15(-1)	1,98(-2)	1,16(-2)	7,73(-2)	1,09(-1)	8,45(-2)	4,46(-2)	1,75(-2)
	15066,0	1499,7	14915,7	14841,3	14767,3	14693,8	14620,8	14548,2	14476,1
2	0,2362	0,0400	0,0466	0,1301	0,0366	0,0104	0,1064	0,1625	0,1288
	2,21(+7)	3,67(+6)	4,21(+6)	1,16(+7)	3,21(+6)	8,99(+5)	9,05(+6)	1,36(+7)	1,06(+7)
	1,45(-1)	2,43(-2)	2,81(-2)	7,82(-2)	2,19(-2)	6,20(-3)	6,30(-2)	9,56(-2)	7,54(-2)
	15126,5	15051,1	14976,2	14901,7	14827,7	14754,2	14681,2	14608,6	14536,5
3	0,2090	0,0063	0,1247	0,0146	0,0509	0,1034	0,0186	0,0205	0,1148
	1,81(+7)	5,84(+6)	1,14(+7)	1,32(+6)	4,51(+6)	9,03(+6)	1,60(+6)	1,73(+6)	9,58(+6)
	1,28(-1)	3,84(-3)	7,56(-2)	8,82(-3)	3,05(-2)	6,17(-2)	1,11(-2)	1,21(-2)	6,74(-2)
	15186,4	15111,0	15036,1	14961,7	14887,7	14814,2	14741,1	14668,6	14596,5

В первой строке приведены значения $q_{v',v''}$, во второй — значения $A_{v',v''}, \text{c}^{-1}$, в третьей — значения $f_{v',v''}^{\text{погл}}$, в четвертой — значения $\nu_{v',v''}, \text{см}^{-1}$.

v'	v''								
	0	1	2	3	4	5	6	7	8
4	0,1436	0,0779	0,0552	0,0363	0,0854	0,0001	0,0722	0,0756	0,0026
	1,37(+7)	7,33(+6)	5,11(+6)	3,31(+6)	7,66(+6)	9,44(+3)	6,29(+6)	6,52(+6)	2,16(+5)
	8,86(-2)	4,77(-2)	3,36(-2)	2,20(-2)	5,14(-2)	6,40(-5)	4,30(-2)	4,50(-2)	1,51(-3)
	15245,9	15170,5	15095,6	15021,1	14947,1	14873,6	14800,6	14728,0	14655,9
5	0,0823	0,1344	0,0001	0,0964	0,0029	0,0711	0,0397	0,0122	0,0871
	7,96(+6)	1,28(+7)	1,34(+4)	8,88(+6)	2,63(+5)	6,35(+6)	3,50(+6)	1,05(+6)	7,45(+6)
	5,10(-2)	8,26(-2)	8,54(-5)	5,86(-2)	1,75(-3)	4,27(-2)	2,38(-2)	7,24(-3)	5,16(-2)
	15304,7	15229,3	15154,4	15079,9	15005,9	14932,5	14859,4	14786,8	14714,8

Обсуждение результатов и заключение. Надежность построенных потенциальных кривых для основного и возбужденного электронных состояний молекулы KRb подтверждена хорошо согласующимися рассчитанными и экспериментальными молекулярными постоянными (см. табл. 2).

Рассчитанные значения времени жизни состояния $B^1\Pi$ плавно увеличиваются с возрастанием значений v и j (см. рис. 2). Экспериментальные значения времени жизни хорошо согласуются с рассчитанными. В работе [20] для состояния $B^1\Pi$ измерено время жизни молекулы KRb, $\tau_{v'=2, j'=41} = 11,6$ нс. Вычисленное в настоящей работе значение $\tau_{v'=2, j'=41} = 11,5$ нс отличается от экспериментального на 1%. В литературе отсутствуют данные о коэффициентах Эйнштейна перехода $B^1\Pi - X^1\Sigma^+$ молекулы KRb. Полные данные о рассчитанных в настоящей работе значениях радиационных параметров молекулы KRb можно получить от автора.

ЛИТЕРАТУРА

1. Lang F., Winkler K., Strauss C., Grimm R., Denschlag J.K. Ultracold triplet molecules in the rovibrational ground state // Phys. Rev. Lett. 2008. Vol. 101. P. 133005–133009.
2. Dark resonances for ground state transfer of molecular quantum gases / M.J. Mark, J.G. Danzl, E. Haller, M. Gustavsson, N. Bouloufa, O. Dulieu, H. Salami, T. Bergeman, H. Ritsch, R. Hart, H.C. Nagerl // Appl. Phys. B. 2009. Vol. 95. P. 219–225.
3. Ghanmi C., Farjallah M., Berriche H. Theoretical study of low-lying electronic states of the LiRb⁺ molecular ion: Structure, spectroscopy and transition dipole moments // Int. Journ. Quant. Chem. 2012. Vol. 112. P. 2403–2410.
4. Смирнов А. Д. Потенциальные кривые основных электронных состояний димеров натрия, калия, цезия // Оптика и спектроскопия. 1996. Т. 81. № 3. С. 390–396.
5. Смирнов А. Д. Факторы Франка–Кондона и потенциальные кривые комбинирующих состояний $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ перехода димера цезия // Оптика и спектроскопия. 1995. Т. 78. № 4. С. 615–621.
6. Смирнов А. Д. Расчет молекулярных постоянных для основных электронных состояний димеров щелочных металлов на основе комбинированных потенциальных кривых // Журн. физ. химии. 2002. Т. 76. № 2. С. 284–290.

7. Смирнов А.Д. Расчет спектроскопических постоянных для основных электронных состояний гетероядерных димеров щелочных металлов // Журн. физ. химии. 2003. Т. 77. № 3. С. 478–483.
8. Смирнов А.Д. Расчет спектроскопических постоянных для основных электронных состояний молекул KRb и RbCs // Журн. структ. химии. 2003. Т. 44. № 5. С. 46–50.
9. Смирнов А.Д. Расчет спектроскопических постоянных для основных электронных состояний молекул CsK, CsLi и RbLi // Журн. структ. химии. 2007. Т. 48. № 1. С. 15–20.
10. Смирнов А.Д. Квантово-химический расчет молекулярных постоянных для димеров, смешанных димеров и молекулярных ионов щелочных металлов // Сборник научных трудов XVI Международной науч.-техн. конф. “Лазеры в науке, технике, медицине”. М.: МНТОРЭС им. А.С. Попова, 2005. 232 с.
11. Смирнов А. Д. Расчет спектроскопических постоянных и радиационных параметров для электронных переходов $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ и $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ димера натрия // Оптика и спектроскопия. 2010. Т. 109. № 5. С. 739–745.
12. Смирнов А.Д. Расчет молекулярных постоянных для $X^1\Sigma_g^+$, $A^1\Sigma_u^+$, $B^1\Pi_u$, $^3\Sigma_u^+$ состояний K_2 // Оптика и спектроскопия. 2002. Т. 93. № 5. С. 739–742.
13. Смирнов А.Д. Расчет молекулярных постоянных для электронных состояний $B^1\Pi_u$, $C^1\Pi_u$, $(1)^1\Pi_g$, $(2)^1\Sigma_g^+$ димера рубидия // Журн. физ. химии. 2011. Т. 85. № 6. С. 1127–1131.
14. Смирнов А. Д. Энергетические и радиационные свойства электронного перехода $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ димеров цезия и рубидия // Инженерный журнал: наука и инновации. 2013. Вып. 6. URL: <http://engjournal.ru/catalog/fundamentals/physics/790.html>
15. Смирнов А.Д. Расчет спектроскопических постоянных для возбужденных электронных состояний $A^1\Sigma_u^+$, $B^1\Pi_u$, $C^1\Pi_u$, $D^1\Sigma_u^+$, $E^1\Sigma_u^+$ димера цезия // Оптика и спектроскопия. 2007. Т. 102. № 1. С. 23–27.
16. Смирнов А.Д. Расчет радиационных параметров $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ перехода димера цезия // Журн. прикл. спектроскопии. 2010. Т. 77. № 5. С. 661–667.
17. Смирнов А.Д. Расчет спектроскопических постоянных и радиационных параметров для электронных переходов $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ и $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ димера лития // Оптика и спектроскопия. 2012. Т. 113. № 4. С. 387–394.
18. Смирнов А.Д. Расчет радиационных параметров для электронных переходов $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ и $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ димера калия // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2013. № 2. С. 67–85.
19. Amiot C., Verges J. The KRb ground electronic state potential up to 10 \AA // J. Chem. Phys. 2000. Vol. 112. No. 16. P. 7068–7075.
20. Okada N., Kasahara S., Ebi T. Optical-optical double resonance polarization spectroscopy of the $B^1\Pi$ state of KRb molecule // J. Chem. Phys. 1996. Vol. 105. No. 9. P. 3458–3463.
21. Цюлик Л. Квантовая химия. Т. 1. Основы и общие методы; пер. с нем. М.: Мир, 1976. 512 с.
22. Kratzer A. Die ultraroten rotationsspektren der halogenwasserstoffe // Z. Phys. 1920. Vol. 3. No. 5. P. 289–307.
23. Molecular Spectra in Gases / Kemble E.C., Birge R.T., Colby W.F. et al. // National Research Council, Washington, D.C., 1930. P. 57.
24. Laher R.R., Khakoo M.A., Antic-Jovanovic A. Radiative transition parameters for the $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ bands system of $^{107,109}\text{Ag}_2$ // J. Mol. Spectr. 2008. Vol. 248. P. 111–121.

REFERENCES

- [1] Lang F., Winkler K., Strauss C., Grimm R., Denschlag J.K. Ultracold triplet molecules in the rovibrational ground state. *Phys. Rev. Lett.*, 2008, vol. 101, pp. 133005–133009.

- [2] Mark M.J., Danzl J.G., Haller E., Gustavsson M., Bouloufa N., Dulieu O., Salami H., Bergeman T., Ritsch H., Hart R., Nagerl H.C. Dark resonances for ground state transfer of molecular quantum gases. *Appl. Phys. B.*, 2009, vol. 95, pp. 219–225.
- [3] Ghanmi C., Farjallah M., Berriche H. Theoretical study of low-lying electronic states of the LiRb^+ molecular ion: Structure, spectroscopy and transition dipole moments. *Int. Journ. Quant. Chem.*, 2012, vol. 112, pp. 2403–2410.
- [4] Smirnov A.D. Potential curves of the ground electronic states of dimers of sodium, potassium, and cesium. *Opt. Spektrosk.* [Opt. Spectrosc.], 1996, vol. 81, no. 3, pp. 352–357 (in Russ.).
- [5] Smirnov A.D. The Franck–Condon factors and potential curves of the combining states for the cesium dimer $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ transition. *Opt. Spectrosc.* [Opt. Spectrosc.], 1995, vol. 78, no. 4, pp. 615–621 (in Russ.).
- [6] Smirnov A.D. Calculation of Molecular Constants for the Ground Electronic States of Alkali Metal Dimers Based on the Combined Potential Curves. *Zh. Fiz. Khim.* [Russian Journal of Physical Chemistry], 2002, vol. 76, no. 2, pp. 284–290 (in Russ.).
- [7] Smirnov A.D. Calculation of Spectroscopic Constants for the Ground Electronic States of Heteronuclear Alkali Metal Dimers. *Zh. Fiz. Khim.* [Russian Journal of Physical Chemistry], 2003, vol. 77, no. 3, pp. 478–483 (in Russ.).
- [8] Smirnov A.D. Calculation of Spectroscopic Constants for the Ground Electronic States of KRb and RbCs Molecules. *Zhurn. strukt. khim.* [Journal of Structural Chemistry], 2003, vol. 44, no. 5, pp. 46–50 (in Russ.).
- [9] Smirnov A.D. Calculation of Spectroscopic Constants for the Ground Electronic States of CsK , CsLi and RbLi Molecules. *Zhurn. Strukt. Khim.* [Journal of Structural Chemistry], 2007, vol. 48, no. 1, pp. 15–20 (in Russ.).
- [10] Smirnov A.D. Quantum Chemical Calculations of Molecular Constants for Alkali Metal Dimers, Mixed Dimers and Molecular Ions. *Sb. Nauch. Tr. XVI Mezhdunar. nauch.-tekhn. konf. "Lazery v nauke, tekhnike, meditsine"* [Proc. Int. Sci.-Tech. Conf. Lasers in Science, Engineering, Medicine]. Moscow, MNTORES im. A.S. Popova Publ., 2005. 232 p. (in Russ.).
- [11] Smirnov A.D. Calculation of Spectroscopic Constants and Radiative Parameters for $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ and $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ Electronic Transitions of Sodium Dimer. *Opt. Spectrosc.* [Opt. Spectrosc.] 2010, vol. 109, no. 5, pp. 680–686 (in Russ.).
- [12] Smirnov A.D. Calculation of Molecular Constants for the $X^1\Sigma_g^+$, $A^1\Sigma_u^+$, $B^1\Pi_u$, $^3\Sigma_u^+$ Conditions of K_2 . *Opt. Spektrosk.* [Opt. Spectrosc.], 2002, vol. 93, no. 5, pp. 739–742 (in Russ.).
- [13] Smirnov A.D. Calculation of Molecular Constants for the $B^1\Pi_u$, $C^1\Pi_u$, $(1)^1\Pi_g$, $(2)^1\Sigma_g^+$ Electronic States of Rubidium Dimer. *Zh. Fiz. Khim.* [Russian Journal of Physical Chemistry], 2011, vol. 85, no. 6, pp. 1127–1131 (in Russ.).
- [14] Smirnov A.D. Energy and Radiative Properties of the $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ Electronic Transition of the Cesium and Rubidium dimers. *Jelektr. nauchno-tehn. Izd. "Inzhenernyy zhurnal: nauka i innovacii"* [El. Sc.-Techn. Publ. "Eng. J.: Science and Innovation"], 2013, iss. 6. URL: <http://engjournal.ru/catalog/fundamentals/physics/790.html>
- [15] Smirnov A.D. Calculation of the Spectroscopic Constants for the Electronic States $A^1\Sigma_u^+$, $B^1\Pi_u$, $C^1\Pi_u$, $D^1\Sigma_u^+$, $E^1\Sigma_u^+$ of the Cesium Dimer. *Opt. Spectrosc.* [Opt. Spectrosc.], 2007, vol. 102, no. 1, p. 12–22 (in Russ.).
- [16] Smirnov A.D. Calculation of Radiative Parameters of the $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ Transition of Cesium Dimer. *Zhurn. Prikl. Spektroskopii* [J. Applied Spectroscopy], 2010, vol. 77, no. 5, pp. 661–667 (in Russ.).
- [17] Smirnov A.D. Calculation of Spectroscopic Constants and Radiative Parameters for $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ and $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ Electronic Transitions of Lithium Dimer. *Opt. Spectrosc.* [Opt. Spectrosc.] 2012, vol. 113, no. 4, pp. 345–352 (in Russ.).

- [18] Smirnov A.D. Calculation of Radiative Parameters for $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ and $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ Electronic Transitions of Potassium Dimer. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Baumana, Estestv. Nauki* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.], 2013, no. 2 (49), pp. 67–85 (in Russ.).
- [19] Amiot C., Verges J. The KRb ground electronic state potential up to 10 Å. *J. Chem. Phys.* 2000, vol. 112, no. 16, pp. 7068–7075.
- [20] Okada N., Kasahara S., Ebi T. Optical-optical double resonance polarization spectroscopy of the $B^1\Pi$ state of KRb molecule. *J. Chem. Phys.*, 1996, vol. 105, no. 9, pp. 3458–3463.
- [21] Zulicke L. Quantenchemie. Ein Lehrgang. Band 1. Grundlagen und allgemeine Methoden. Berlin, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1973.
- [22] Kratzer A. Die ultraroten rotationsspektren der halogenwasserstoffe. *Z. Phys.*, 1920, vol. 3, no. 5, pp. 289–307.
- [23] Kemble E.C., Birge R.T., Colby W.F. et al. Molecular Spectra in Gases. National Research Council, Washington, D.C., 1930, p. 57.
- [24] Laher R.R., Khakoo M.A., Antic-Jovanovic A. Radiative transition parameters for the $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ bands system of $^{107,109}\text{Ag}_2$. *J. Mol. Spectr.*, 2008, vol. 248, pp. 111–121.

Статья поступила в редакцию 24.06.2015

Смирнов Александр Давыдович — канд. хим. наук, доцент кафедры “Химия” МГТУ им. Н.Э. Баумана.

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5.

Smirnov A.D. — Ph.D. (Chem.), Associate Professor, Department of Chemistry, Bauman Moscow State Technical University.

Bauman Moscow State Technical University, 2-ya Baumanskaya ul. 5, Moscow, 105005 Russian Federation.

Просьба ссылаться на эту статью следующим образом:

Смирнов А.Д. Расчет радиационных параметров электронного перехода $B^1\Pi - X^1\Sigma^+$ молекулы KRb // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2015. № 6. С. 52–62.

Please cite this article in English as:

Smirnov A.D. Calculation of radiative parameters for $B^1\Pi - X^1\Sigma^+$ electron transition of KRb molecule. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Baumana, Estestv. Nauki* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.], 2015, no. 6, pp. 52–62.