

## РАСЧЕТ РАДИАЦИОННЫХ ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕКТРОННОГО ПЕРЕХОДА $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ МОЛЕКУЛЫ $KLi$

А.Д. Смирнов

adsmir@mail.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация

---

### Аннотация

Проведен расчет радиационных параметров (коэффициентов Эйнштейна спонтанного излучения, сил осциллятора для поглощения, факторов Франка — Кондона,  $r$ -центроида, волновых чисел колебательно-вращательных переходов в системе полос  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  молекулы  $KLi$  ( $0 \leq v' \leq 20$ ,  $0 \leq v'' \leq 36$ ,  $j' = 0, 30, 50, 70$ )) и радиационных времен жизни возбужденного электронного состояния. Расчеты выполнены на основе полуэмпирических потенциальных кривых, построенных в настоящей работе. Колебательно-вращательные энергии и соответствующие им волновые функции комбинирующих электронных состояний найдены в результате численного решения радиального волнового уравнения. Проведено сравнение рассчитанных значений энергии с экспериментальными данными. Радиационные времена жизни получены впервые

### Ключевые слова

*Потенциальная кривая, радиальное волновое уравнение, коэффициенты Эйнштейна, силы осциллятора, радиационное время жизни возбужденного электронного состояния, факторы Франка — Кондона,  $r$ -центроида*

Поступила в редакцию 10.06.2016  
© МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2017

---

**Введение.** За последние годы значительно выросло число экспериментальных и теоретических публикаций, связанных с получением гомо- и гетероядерных димеров щелочных металлов в основных и возбужденных электронных состояниях при использовании 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 радиационных времен жизни электронных состояний молекул [3].

Молекулярные постоянные для основных и возбужденных электронных состояний и радиационные параметры для электронных переходов гомоядерных димеров ( $Li_2$ ,  $Na_2$ ,  $K_2$ ,  $Rb_2$ ,  $Cs_2$ ) и молекулярных ионов димеров атомов щелочных металлов ( $Li_2^+$ ,  $Na_2^+$ ,  $K_2^+$ ), а также для гетероядерных димеров ( $NaK$ ,  $NaRb$ ,  $NaCs$ ,  $KRb$ ,  $NaLi$ ) были рассчитаны в работах [4–11]. Расчеты проведены квантово-химическим методом на основе полуэмпирических потенциальных кривых. Сравнение результатов расчета молекулярных постоянных и радиационных параметров с экспериментальными данными показало эффективность метода расчета. В настоящей работе аналогичный метод применен для расчета значений молекулярных постоянных и радиационных параметров электронного перехода

$A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  молекулы  $^{39}\text{K}^7\text{Li}$ . Теоретическое изучение электронной структуры этой молекулы были выполнены в работах [12, 13]. Система полос  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  молекулы KLi расположена в ближней инфракрасной области спектра. Экспериментальные исследования спектра  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  молекулы KLi проведены с использованием лазерных методик и спектральной техники высокого разрешения [14, 15]. В результате этих исследований были получены колебательные и вращательные молекулярные постоянные для основного и возбужденного электронных состояний, необходимые для построения полуэмпирических потенциальных кривых.

**Построение потенциальных кривых.** Для построения потенциальных кривых основного и возбужденного состояний использована гибридная модель, состоящая из нескольких потенциальных функций, хорошо описывающих различные участки потенциальной кривой. Нижний участок потенциала аппроксимирован функцией возмущенного осциллятора Морзе (ВМ)

$$U(R) = V_e \left( y^2 + \sum_{n=4}^{\infty} b_n y^n \right), \quad (1)$$

где  $y = 1 - \exp[-\rho(R - R_e)]$ ;  $R, R_e$  — межъядерное расстояние и равновесное межъядерное расстояние;  $V_e, \rho, b_n$  — параметры потенциальной функции ВМ.

В средней части потенциальной кривой, которая представляет собой экспериментально исследованный диапазон колебательных квантовых чисел, использован 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

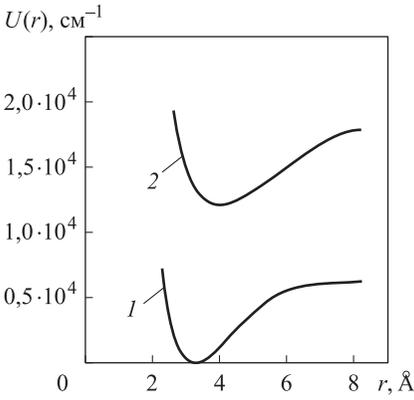
$$U(R) = D_e - \sum \frac{C_n}{R^n} - \Delta U_{\text{обм}}(R), \quad (2)$$

где  $D_e$  — экспериментальная энергия диссоциации;  $C_n$  — параметры функции (2),  $n = 6, 8, 10, \dots$ ;  $\Delta U_{\text{обм}}(r)$  — потенциал обменного взаимодействия атомов в молекуле, обусловленный перекрыванием их электронных оболочек. Для области потенциальной кривой, прилегающей к диссоциационному пределу молекулы, потенциал обменного взаимодействия определяют функцией [16]

$$\Delta U_{\text{обм}}(R) = BR^\alpha \exp(-\beta R), \quad (3)$$

где  $B, \alpha, \beta$  — параметры потенциала (3).

Различные участки потенциальных кривых для основного и возбужденного состояний (ВМ, РКР и (2)) гладко сшивались в единую кривую. Интерполяция потенциальных кривых РКР между поворотными точками проводилась кубическими сплайнами. Потенциальные кривые для основного и возбужденного электронных состояний электронного перехода  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  молекулы KLi, построенные по рассчитанным в настоящей работе значениям параметров, приведены на рис. 1.



**Рис. 1.** Потенциальные кривые для основного  $X^1\Sigma^+$  (1) и возбужденного  $A^1\Sigma^+$  (2) состояний электронного перехода  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  молекулы KLi

Для проверки надежности построенных потенциальных кривых на их основе были вычислены значения колебательных энергий, вращательных и центробежных молекулярных постоянных. Колебательные энергии найдены в результате численного решения радиального волнового уравнения на основе потенциальных кривых построенных в настоящей работе. Значения вращательных и центробежных постоянных для основного и возбужденного состояний были определены по выражениям, полученным с помощью теории возмущений для модели вращающегося осциллятора двухатомной молекулы [17]:

$$B_v = \beta \langle v | R^{-2} | v \rangle; \tag{4}$$

$$D_v = \beta^2 \sum_{u \neq v} \frac{\langle u | R^{-2} | v \rangle^2}{(E_u - E_v)}; \tag{5}$$

$$H_v = \beta^3 \sum_{t \neq v} \sum_{u \neq v} \frac{\langle v | R^{-2} | u \rangle \langle u | R^{-2} | t \rangle \langle t | R^{-2} | v \rangle}{(E_u - E_v)(E_t - E_v)} - \beta^2 B_v \sum_{u \neq v} \frac{\langle u | R^{-2} | v \rangle^2}{(E_u - E_v)^2}, \tag{6}$$

где  $\langle u | R^{-2} | v \rangle = \int_0^\infty \psi_u(R) R^{-2} \psi_v(R) dR$  — матричный элемент.

Стандартное отклонение расчетных значений колебательной энергии от экспериментальных значений  $\sigma_E = \left( \sum_{i=1}^n \delta E_i^2 / n \right)^{1/2}$  для состояния  $A^1\Sigma^+$  равно  $0,036 \text{ см}^{-1}$  ( $n = 31$ ), для состояния  $X^1\Sigma^+$  —  $0,044 \text{ см}^{-1}$  ( $n = 36$ ). Для вращательных постоянных стандартные отклонения для состояния  $A^1\Sigma^+$  составляют  $3,1 \cdot 10^{-5} \text{ см}^{-1}$  ( $n = 31$ ), для состояния  $X^1\Sigma^+$  —  $4,0 \cdot 10^{-5} \text{ см}^{-1}$  ( $n = 36$ ). Рассчитанные по соотношениям (5) и (6) значения центробежных постоянных для основного и возбужденного электронных состояний молекулы KLi приведены на рис. 2.

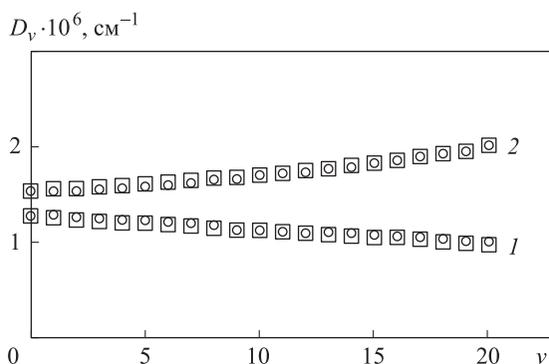
Рассчитанные на основе потенциальных кривых значения колебательных энергий, вращательные и центробежные постоянные были аппроксимированы степенными функциями, параметры которых являются спектроскопическими молекулярными постоянными

$$E_v = \omega_e(v+0,5) - \omega_e x_e(v+0,5)^2 + \dots;$$

$$B_v = B_e - \alpha_e(v+0,5) + \gamma_e(v+0,5)^2 + \dots;$$

$$D_v = D_e - \beta_e(v+0,5) + \delta_e(v+0,5)^2 + \dots;$$

$$H_v = H_e - \xi(v+0,5) + \epsilon_e(v+0,5)^2 + \dots$$



**Рис. 2.** Сравнение центробежных постоянных  $D_v$ , рассчитанных в настоящей работе, с экспериментальными значениями для основного и возбужденного состояний электронного перехода  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  молекулы KLi для состояний  $A^1\Sigma^+$  (1) и  $X^1\Sigma^+$  (2):

○ — результаты расчета; □ — экспериментальные значения [14, 15]

Значения молекулярных постоянных, полученные из оптимальных аппроксимирующих функций для состояний  $X^1\Sigma^+$  и  $A^1\Sigma^+$  молекулы KLi, а также экспериментальные значения приведены в табл. 1. Экспериментальные и расчетные значения частоты колебаний различаются на 0,005 ( $X^1\Sigma^+$ ) и 0,001 % ( $A^1\Sigma^+$ ), вращательные постоянные — на 0,03 и 0,05 %.

Таблица 1

**Экспериментальные (числитель) и расчетные (знаменатель) значения молекулярных постоянных, полученные из оптимальных аппроксимирующих функций для состояний  $A^1\Sigma^+$  и  $X^1\Sigma^+$  молекулы KLi**

Молекулярные постоянные	$A^1\Sigma^+$	$X^1\Sigma^+$
$\omega_e$	137,0821/137,0812	212,0199/212,0220
$\omega_e x_e$	0,9890/0,9860	1,259/1,260
$\omega_e y_e$	2,559(-2)/2,53 (-2)	0,249(-2)/0,230(-2)
$\omega_e z_e$	-5,110(-4)/-4,998(-4)	0,872(-4)/1,001(-4)
$\omega_e \alpha_e$	3,88(-7)/3,73(-7)	-/-
$B_e$	0,182043/0,182095	0,2576/0,2574
$\alpha_e$	2,075(-3)/2,076(-3)	1,878(-3)/1,887(-3)
$\beta_e$	4,189(-5)/4,177(-5)	-1,414(-5)/-1,335(-5)
$\gamma_e$	5,75 (-7)/5,71 (-7)	-/5,55(-8)
$D_e$	1,264(-6)/1,284(-6)*	1,515(-6)/1,520(-6)*
$H_e$	5,16(-12)/5,49(-12)**	8,90(-12)/8,97(-12)**

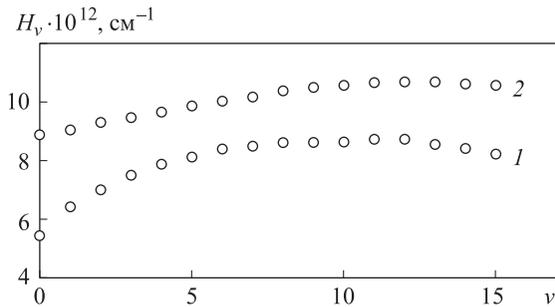
\* , \*\* — значения центробежных постоянных  $D_e$  и  $H_e$  рассчитаны с использованием экспериментальных данных по эмпирическим соотношениям Кратцера и Кэмбла

Полученные на основе потенциальных кривых значения центробежных постоянных (рис. 3) также были сопоставлены со значениями, вычисленными по эмпирическому соотношению Кратцера [18]

$$D_e = \frac{4B_e^3}{\omega_e^2} \tag{7}$$

и по соотношению Кэмбла [19]

$$H_e = \frac{2D_e(12B_e^2 - \alpha_e\omega_e)}{3\omega_e^2}. \tag{8}$$



**Рис. 3.** Рассчитанные значения центробежных постоянных  $H_v$  для основного  $A^1\Sigma^+$  (1) и возбужденного  $X^1\Sigma^+$  (2) состояний электронного перехода  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  молекулы KLi

Значения величин  $D_e$  и  $H_e$ , рассчитанные по соотношениям (11) и (12) для основного и возбужденного состояний, отличаются от значений, полученных с помощью потенциальных кривых, на 0,3 и 5 %.

**Расчет значений радиационных параметров.** Для электронного перехода  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  молекулы KLi расчет значений радиационных параметров проведен на основе построенных потенциальных кривых. Для электронного колебательно-вращательного перехода двухатомной молекулы коэффициент Эйнштейна  $A_{v'',j''}^{v',j'}$  для спонтанного излучения,  $s^{-1}$ , и сила осциллятора для поглощения  $(f_{v'',j''}^{v',j'})^{погл}$  (безразмерная величина), связаны с зависимостью матричного элемента дипольного момента электронного перехода от межъядерного расстояния  $R_e(r)$ , ат. ед., и определяются по выражениям [20]:

$$A_{v'',j''}^{v',j'} = 2,026 \cdot 10^{-6} \cdot \frac{(v_{v'',j''}^{v',j'})^3 (2 - \delta_{0,\Lambda'+\Lambda''})}{(2 - \delta_{0,\Lambda''})} \left[ \langle \Psi_{v',j'}(r) | R_e(r) | \Psi_{v'',j''}(r) \rangle \right]^2 \frac{S_{j'j''}}{2j''+1}; \tag{9}$$

$$(f_{v'',j''}^{v',j'})^{погл} = 3,0376 \cdot 10^{-6} \cdot \frac{v_{v'',j''}^{v',j'} (2 - \delta_{0,\Lambda+\Lambda''})}{(2 - \delta_{0,\Lambda''})} \left[ \langle \Psi_{v',j'}(r) | R_e(r) | \Psi_{v'',j''}(r) \rangle \right]^2 \frac{S_{j'j''}}{2j''+1}, \tag{10}$$

где  $\delta_{0,\Lambda}$  — символ Кронекера;  $\nu_{v',j'}^{v',j'}$  — волновое число вращательной линии электронного перехода,  $\text{см}^{-1}$ ;  $\psi_{v',j'}(r)$ ,  $\psi_{v'',j''}(r)$  — колебательно-вращательные волновые функции возбужденного и основного электронных состояний;  $S_{j'j''}$  — фактор Хенля — Лондона.

Волновые числа вращательных линий электронного перехода были найдены по соотношению

$$\nu_{v'',j''}^{v',j'} = T_e' + E_{v',j'}' - E_{v'',j''}'' \quad (11)$$

Здесь  $T_e'$  — электронная энергия возбужденного состояния;  $E_{v',j'}'$ ,  $E_{v'',j''}''$  — колебательно-вращательные энергии электронных состояний. При определении волновых чисел вращательных линий использованы значения  $T_e''$  ( $A^1\Sigma^+$ ), взятые из работы [15]. 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 применением эффективного потенциала

$$U_{\text{эфф}}(r) = U(r) + \frac{h}{8\pi^2\mu c} \frac{j(j+1)}{r^2}, \quad (12)$$

где  $\mu$  — приведенная масса молекулы.

Важными радиационными характеристиками электронного перехода являются фактор Франка — Кондона  $q_{v'',j''}^{v',j'}$  и  $r_{v'',j''}^{v',j'}$ -центроид. Фактор Франка — Кондона определяет относительную вероятность электронного колебательно-вращательного перехода

$$q_{v'',j''}^{v',j'} = \left| \int_0^\infty \psi_{v',j'}(r) \psi_{v'',j''}(r) dr \right|^2 \quad (13)$$

Среднему межъядерному расстоянию этого перехода соответствует  $r_{v'',j''}^{v',j'}$ -центроид вида

$$r_{v'',j''}^{v',j'} = \frac{\int_0^\infty \psi_{v',j'}(r) r \psi_{v'',j''}(r) dr}{\int_0^\infty \psi_{v',j'}(r) \psi_{v'',j''}(r) dr} \quad (14)$$

Времена жизни колебательно-вращательных уровней возбужденного состояния рассчитаны с использованием коэффициентов Эйнштейна для вращательных линий R и P — ветвей электронного перехода  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ :

$$\tau^{v',j'} = \left( \sum_{v''=0} A_{v'',j''=j'-1}^{v',j'} + \sum_{v''=0} A_{v'',j''=j'+1}^{v',j'} \right)^{-1} \quad (15)$$

Расчет значений  $A_{v'',j''}^{v',j'}$ ,  $(f_{v'',j''}^{v',j'})^{\text{погл}}$ ,  $q_{v'',j''}^{v',j'}$ ,  $\nu_{v'',j''}^{v',j'}$ ,  $\tau^{v',j'}$  выполнен по соотношениям (9)–(15). При расчете значений  $A_{v'',j''}^{v',j'}$  и  $(f_{v'',j''}^{v',j'})^{\text{погл}}$  была использована

функция  $R_e(r)$  для электронного перехода  $A^1\Sigma^+-X^1\Sigma^+$  молекулы KLi, определенная в работе [13] квантово-химическим методом.

Вычислены значения радиационных параметров для электронного перехода  $A^1\Sigma^+-X^1\Sigma^+$  молекулы KLi ( $0 \leq \nu' \leq 20$ ,  $j' = 0, 30, 50, 70$ ;  $0 \leq \nu'' \leq 36$ ), а также радиационные времена жизни для возбужденного электронного состояния. Вследствие громоздкости рассчитанных массивов значений радиационных параметров приведена часть полученных результатов. Результаты расчета значений радиационных параметров для электронно-колебательных полос ( $0 \leq \nu' \leq 5$ ;  $0 \leq \nu'' \leq 8$ ;  $j' = 0$ ) представлены в табл. 2. Результаты расчета значений радиационных времен жизни ( $0 \leq \nu' \leq 20$ ;  $j' = 0, 30, 50, 70$ ) приведены на рис. 4.

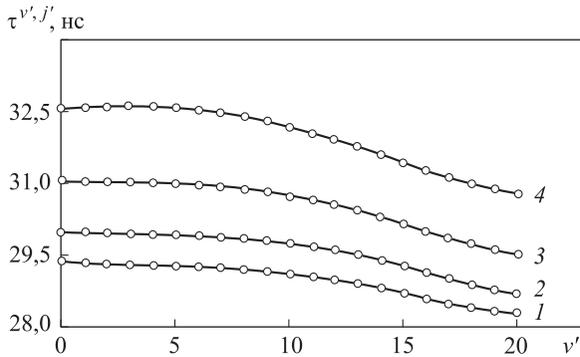


Рис. 4. Результаты расчета значений радиационных времен жизни для электронного состояния  $A^1\Sigma^+$  молекулы KLi при  $j' = 0$  (1), 30 (2), 50 (3) и 70 (4)

Таблица 2

**Результаты расчета значений радиационных параметров  $A^1\Sigma^+-X^1\Sigma^+$  перехода молекулы KLi ( $j' = 0$ )**

$\nu'$	$\nu''$								
	0	1	2	3	4	5	6	7	8
0	0,0025	0,0175	0,0573	0,1193	0,1774	0,1995	0,1762	0,1250	0,0723
	3,6104	3,6747	3,7402	3,8071	3,8756	3,9459	4,0184	4,0933	4,1710
	1,22(+5)	7,75(+5)	2,36(+6)	4,61(+6)	6,41(+6)	6,78(+6)	5,65(+6)	3,80(+6)	2,09(+6)
	1,26(-3)	8,27(-3)	2,62(-2)	5,28(-2)	7,62(-2)	8,35(-2)	7,21(-2)	5,02(-2)	2,86(-2)
	12059,8	11850,3	11643,4	11438,9	11237,2	11037,9	10841,4	10647,5	10456,3
1	0,0124	0,0596	0,1235	0,1354	0,0715	0,0062	0,0179	0,0909	0,1482
	3,5689	3,6317	3,6953	3,7596	3,8238	3,8744	3,9830	4,0471	4,1201
	6,20(+5)	2,76(+6)	5,32(+6)	5,43(+6)	2,68(+6)	2,10(+5)	6,09(+5)	2,88(+6)	4,44(+6)
	6,25(-3)	2,88(-2)	5,74(-2)	6,08(-2)	3,10(-2)	2,52(-3)	7,58(-3)	3,72(-2)	5,94(-2)
	12194,3	11985,5	11778,5	11574,1	11372,3	11173,2	10976,6	10782,7	10591,5
2	0,0323	0,1037	0,1177	0,0398	0,0017	0,0606	0,0937	0,0399	0,0001
	3,5288	3,5900	3,6513	3,7111	3,8222	3,8550	3,9189	3,9821	4,4143
	1,69(+6)	5,02(+6)	5,29(+6)	1,66(+6)	6,98(+4)	2,24(+6)	3,24(+6)	129(+6)	2,50(+3)
	1,67(-2)	5,12(-2)	5,58(-2)	1,82(-2)	7,88(-4)	2,63(-2)	3,94(-2)	1,63(-2)	3,26(-5)
	12328,4	12115,9	11911,9	11707,6	11505,8	11306,6	11110,0	10916,1	10724,9

$v'$	$v''$								
	0	1	2	3	4	5	6	7	8
3	0,0597	0,1192	0,0541	0,0009	0,0605	0,0671	0,0054	0,0270	0,0824
	3,4898	3,5496	3,6080	3,7227	3,7428	3,8026	3,8454	3,9540	4,0148
	3,27(+6)	6,03(+6)	2,53(+6)	3,99(+4)	2,48(+6)	2,57(+6)	1,87(+5)	9,32(+5)	2,65(+6)
	3,16(-2)	6,02(-2)	2,62(-2)	4,26(-4)	2,75(-2)	2,94(-2)	2,22(-3)	1,14(-2)	3,38(-2)
	12460,2	11250,7	12043,8	11839,4	11637,6	11438,4	11241,8	11047,9	10856,7
4	0,0879	0,0975	0,0052	0,0405	0,0645	0,0032	0,0354	0,0648	0,0090
	3,4520	3,5101	3,5561	3,6390	3,6956	3,7306	3,8354	3,8933	3,9396
	5,04(+6)	5,16(+6)	2,48(+5)	1,86(+6)	2,75(+6)	1,23(+5)	1,34(+6)	2,28(+6)	2,94(+5)
	4,77(-2)	5,04(-2)	2,51(-3)	1,95(-2)	2,98(-2)	1,37(-3)	1,55(-2)	2,74(-2)	3,65(-3)
	12570,5	12380,9	12174,0	11969,6	11767,8	11568,6	11372,1	11178,2	10986,9
5	0,1097	0,0555	0,0071	0,0677	0,0135	0,0236	0,0574	0,0037	0,0328
	3,4151	3,4711	3,5469	3,5953	3,6451	3,7290	3,7858	3,8151	3,9869
	6,58(+6)	3,06(+7)	3,72(+5)	3,24(+6)	5,93(+5)	9,95(+5)	2,24(+6)	1,30(+5)	1,50(+6)
	6,10(-2)	2,93(-2)	3,69(-3)	3,32(-2)	6,28(-3)	1,09(-2)	2,54(-2)	1,53(-3)	1,39(-2)
	12718,3	12509,9	12302,9	12088,5	11896,7	11697,5	11500,9	11307,1	11112,9

Примечание. В первой строке приведено значение  $q_{v',v''}$ , во второй строке — значение  $r_{v',v''}$ , Å, в третьей строке — значение  $A_{v',v''}$ , с<sup>-1</sup>, в четвертой строке — значение  $(f_{v',v''})_{\text{пол}}$  (безразмерная величина), в пятой строке — значение  $\nu_{v',v''}$ , см<sup>-1</sup>.

**Закключение.** Надежность построенных потенциальных кривых для основного и возбужденного электронных состояний KLi подтверждена хорошо согласующимися значениями молекулярных постоянных, рассчитанных в настоящей работе, и экспериментальными данными (см. табл. 1). В литературе отсутствуют данные по радиационным временам жизни электронного состояния  $A^1\Sigma^+$  молекулы KLi. Вычисленные здесь значения радиационных времен жизни медленно уменьшаются с возрастанием значения колебательного квантового числа, например, для  $j' = 0$  от  $\tau_{v=0} = 29,37$  нс до  $\tau_{v=20} = 28,25$  нс (см. рис. 4). Полные данные по рассчитанным значениям радиационных параметров молекулы KLi могут быть получены от автора настоящей работы.

## 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. 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. P. 219–225.
3. Ghanmi C., Farjallah M., Berriche H. Theoretical study of low-lying electronic states of the LiRb<sup>+</sup> molecular ion: Structure, spectroscopy and transition dipole moments // Int. Journal. Quant. Chem. 2012. Vol. 112. P. 2403–2410.
4. 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.

5. 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.
6. 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.
7. 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. DOI: 10.18698/2308-6033-2013-6-790  
URL: <http://engjournal.ru/catalog/fundamentals/physics/790.html>
8. Смирнов А.Д. Расчет радиационных параметров катионов димеров лития, натрия и калия // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2015. № 4. С. 45–56.  
DOI: 10.18698/1812-3368-2015-4-45-56
9. Смирнов А.Д. Расчет спектроскопических постоянных и радиационных параметров для электронного перехода  $B^1\Pi - X^1\Sigma^+$  молекул NaK, NaRb, NaCs // Оптика и спектроскопия. 2014. Т. 117. № 3. С. 373–380.
10. 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. DOI: 10.18698/1812-3368-2015-6-52-62
11. Федоров В.В., Смирнов А.Д. Расчет радиационных параметров для электронного перехода  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  молекулы NaLi // Сб. научных трудов VI Международной научно-практической конференции «Современные тенденции развития науки и технологий». Белгород, 30 сентября 2015 г. В 10 ч. Ч. 3. № 6. 144 с.
12. Dardouri R., Habli H., Oujia B., Gadea F.Y. Theoretical study of the electronic structure of KLi molecule: Adiabatic and diabatic potential energy curves and dipole moments // Chem. Physics. 2012. Vol. 399. P. 65–79.
13. Bellayouni S., Jendoubi I., Marbrouk N., Berriche H. Systematic study of the electronic properties and trends in the LiX (X = Na, K, Rb, Cs and Fr) // Advances in Quantum Chemistry. 2014. Vol. 68. P. 203–238.
14. Martin F., Crozet P., Ross A. J., Aubert-Frecon M., Kowalczyk P., Jastzebski W., Pashov A. On the  $X^1\Sigma^+$  state of KLi // J. Chem. Phys. 2001. Vol. 115. No. 9. P. 4118–4124.
15. Grochola A., Szczepkowski J., Jastzebski W., Kowalczyk P. The  $A^1\Sigma^+$  electronic state of KLi molecule // Chem. Phys. Letters. 2012. Vol. 535. P. 17–20.
16. Hadinger Gisele, Hadinger Gerold, Magnier S., Aubert-Frecon M. A particular case of asymptotic formulas for exchange energy between two long-range interacting atoms with open valance shells of any type: Application to the ground state of AlKaLi dimers // J. Mol. Spectr. 1996. Vol. 175. No. 2. P. 441–444.
17. Цюлике Л. Квантовая химия. Т. 1. Основы и общие методы / пер. с нем. М.: Мир, 1976. 512 с.
18. Kratzer A. Die ultraroten rotationsspektren der halogenwasserstoffe // Z. Phys. 1920. Vol. 3. No. 5. P. 289–307.

19. *Kemble E.C., Birge R.T., Colby W.F. et al.* Molecular spectra in gases. National Research Council, Washington, D.C., 1930. P. 57.

20. *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.

**Смирнов Александр Давыдович** — канд. хим. наук, доцент кафедры «Химия» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5).

**Просьба ссылаться на эту статью следующим образом:**

Смирнов А.Д. Расчет радиационных параметров электронного перехода  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  молекулы KLi // *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки.* 2017. № 1. С. 112–123. DOI: 10.18698/1812-3368-2017-1-112-123

**CALCULATION OF RADIATIVE PARAMETERS FOR  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  ELECTRONIC TRANSITION OF THE KLi MOLECULE**

A.D. Smirnov

adsmir@mail.ru

**Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation**

**Abstract**

The purpose of this study was to calculate the radiative parameters (Einstein coefficients of spontaneous radiation, oscillator strengths for absorption, Franck — Condon factors,  $r$ -centroid, vibrational-rotational wave numbers in electronic transition  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  for the molecule KLi ( $0 \leq v' \leq 20$ ,  $0 \leq v'' \leq 36$ ,  $j' = 0, 30, 50, 70$ )) and radiative lifetimes of excited electronic state. The vibrational energies and the wave functions are found as a result of numerical solving of the radial wave equation based on potential energy curves constructed in the present work. We compared the calculated energies with experimental values and for the first time obtained the radiative lifetimes

**Keywords**

*Potential energy curve, radial wave equation, Einstein coefficients, oscillator strengths, radiative lifetime of the excited electron state, Franck — Condon factors*

**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  $\text{LiRb}^+$  molecular ion: Structure, spectroscopy and transition dipole moments. *Int. Journal. Quant. Chem.*, 2012, vol. 112, pp. 2403–2410.
- [4] 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.*, 2012, vol. 113, no. 4, pp. 345–352. DOI: 10.1134/S0030400X12080176

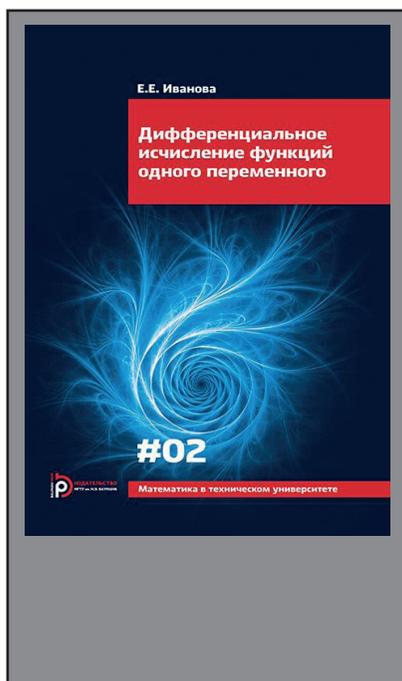
- [5] Smirnov A.D. Calculation of spectroscopic constants and radiative parameters for  $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$  and  $B^1\Pi_u^+ - X^1\Sigma_g^+$  electronic transitions of sodium dimer. *Opt. Spectrosc.*, 2010, vol. 109, no. 5, pp. 680–686. DOI: 10.1134/S0030400X10110068
- [6] Smirnov A.D. 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, pp. 67–85 (in Russ.).
- [7] Smirnov A.D. Energy and radiation properties of the electronic transition of the cesium and rubidium dimers. *Jelektr. nauchno-tekh. izd. "Inzhenernyy zhurnal: nauka i innovacii"* [El. Sc.-Tech. Publ. "Eng. J.: Science and Innovation"], 2013, iss. 6. DOI: 10.18698/2308-6033-2013-6-790  
Available at: <http://engjournal.ru/eng/catalog/fundamentals/physics/790.html>
- [8] Smirnov A.D. Calculation of radiative parameters for AlKaLi-dimer cations of lithium, sodium and potassium. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Baumana, Estestv. Nauki* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.], 2015, no. 4, pp. 45–56 (in Russ.). DOI: 10.18698/1812-3368-2015-4-45-56
- [9] Smirnov A.D. Calculation of spectroscopic constants and radiative parameters for the  $B^1\Pi^+ - X^1\Sigma^+$  electronic transitions of NaK, NaRb, and NaCs molecules. *Opt. Spectrosc.*, 2014, vol. 117, no. 3, pp. 358–365. DOI: 10.1134/S0030400X14080244
- [10] 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 (in Russ.). DOI: 10.18698/1812-3368-2015-6-52-62
- [11] Fedorov V.V., Smirnov A.D. Calculation of radiative parameters for  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  electron transition of NaLi molecule. *Sb. nauch. tr. VI Mezhdunar. nauch-prakt. konf. "Sovremennyye tendentsii razvitiya nauki i tekhnologii"* [Proc. VI Int. Sci.-Practical. Conf. Modern Trends in the Development of Science and Technologies]. In 10 parts. Part 3, no. 6. 144 p.
- [12] Dardouri R., Habli H., Oujia B., Gadea F.Y. Theoretical study of the electronic structure of KLi molecule: Adiabatic and diabatic potential energy curves and dipole moments. *Chem. Physics*, 2012, vol. 399, pp. 65–79.
- [13] Bellayouni S., Jendoubi I., Marbrouk N., Berriche H. Systematic study of the electronic properties and trends in the LiX (X = Na, K, Rb, Cs and Fr). *Advances in Quantum Chemistry*, 2014, vol. 68, pp. 203–238.
- [14] Martin F., Crozet P., Ross A.J., Aubert-Frecon M., Kowalczyk P., Jastzebski W., Pashov A. On the  $X^1\Sigma^+$  state of KLi. *J. Chem. Phys.*, 2001, vol. 115, no. 9, pp. 4118–4124.
- [15] Grochola A., Szczepkowski J., Jastzebski W., Kowalczyk P. The  $A^1\Sigma^+$  electronic state of KLi molecule. *Chem. Phys. Letters*, 2012, vol. 535, pp. 17–20.
- [16] Hadinger Gisele, Hadinger Gerold, Magnier S., Aubert-Frecon M. A particular case of asymptotic formulas for exchange energy between two long-range interacting atoms with open valance shells of any type: Application to the ground state of AlKaLi dimmers. *J. Mol. Spectr.*, 1996, vol. 175, no. 2, pp. 441–444.

- [17] Zulicke L. *Quantenchemie. Ein Lehrgang. Band 1. Grundlagen und allgemeine methoden.* Berlin, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1973.
- [18] Kratzer A. Die ultraroten rotationsspektren der halogenwasserstoffe. *Z. Phys.*, 1920, vol. 3, no. 5, pp. 289–307.
- [19] Kemble E.C., Birge R.T., Colby W.F. et al. *Molecular spectra in gases.* National Research Council, Washington, D.C., 1930, p. 57.
- [20] 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.

**Smirnov A.D.** — Cand. Sci. (Chem.), Assoc. Professor of Chemistry Department, Bauman Moscow State Technical University (2-ya Baumanskaya ul. 5, Moscow, 105005 Russian Federation).

**Please cite this article in English as:**

Smirnov A.D. Calculation of Radiative Parameters for  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  Electronic Transition of the KLi Molecule. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Baumana, Estestv. Nauki* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.], 2017, no. 1, pp. 112–123.  
DOI: 10.18698/1812-3368-2017-1-112-123



В Издательстве МГТУ им. Н.Э. Баумана  
вышло в свет учебное пособие автора  
**Е.Е. Ивановой**

**«Элементы конечной алгебры: группы,  
кольца, поля, линейные пространства»**

Книга является вторым выпуском комплекса учебников «Математика в техническом университете». Знакомит читателя с понятиями производной и дифференциала, с их использованием при исследовании функций одного переменного. Большое внимание уделено геометрическим приложениям дифференциального исчисления и его применению к решению нелинейных уравнений, интерполации и численному дифференцированию функций. Приведены примеры и задачи физического, механического и технического содержания.

**По вопросам приобретения обращайтесь:**

105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1  
+7 (499) 263-60-45  
press@bmstu.ru