

УДК 539.194

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

А.Д. Смирнов

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

e-mail: adsmir@mail.ru

Рассчитаны радиационные параметры (коэффициенты Эйнштейна спонтанного излучения, силы осциллятора для поглощения, факторы Франка–Кондона, волновые числа вращательных линий колебательно-вращательных полос в электронных переходах $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ ($0 \leq \nu' \leq 20$, $0 \leq \nu'' \leq 40$, $j' = 0, 30, 50, 80, 100$), $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ ($0 \leq \nu' \leq 20$, $0 \leq \nu'' \leq 25$, $j' = 0, 43, 59, 61, 80, 100$) и радиационные времена жизни для колебательно-вращательных уровней возбужденных электронных состояний димера калия). Колебательно-вращательные энергии и соответствующие волновые функции для основных и возбужденных электронных состояний найдены в результате численного решения радиального волнового уравнения на основе построенных потенциальных кривых. Рассчитанные радиационные параметры и времена жизни сравнены с экспериментальными и теоретическими литературными данными.

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

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

A.D. Smirnov

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia

e-mail: adsmir@mail.ru

The radiative parameters are calculated: Einstein coefficients of spontaneous radiation, oscillator strengths for absorption, Frank–Condon factors, wavenumbers of rotational lines of vibrational-rotational bands in electronic transitions $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ ($0 \leq \nu' \leq 20$, $0 \leq \nu'' \leq 40$, $j' = 0, 30, 50, 80, 100$), $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ ($0 \leq \nu' \leq 20$, $0 \leq \nu'' \leq 25$, $j' = 0, 43, 59, 61, 80, 100$), and also radiative lifetimes for vibrational-rotational levels of excited electronic states of potassium dimer are determined. The vibrational-rotational energies and the appropriate wave functions for the ground and excited electronic states are found as a result of numerical solving of the radial wave equation based on constructed potential curves. The calculated radiative parameters and lifetimes are compared with experimental and theoretical data from literature.

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

Знание радиационных свойств димеров щелочных металлов необходимо для создания мощных лазерных источников непрерывного

излучения [1, 2]. Радиационные параметры (коэффициенты Эйнштейна спонтанного излучения, силы осциллятора для поглощения, радиационные времена жизни возбужденных электронных состояний) для молекул Na_2 , Cs_2 , Li_2 рассчитаны в работах [3–5]. Расчеты радиационных параметров проводились на основе полуэмпирических потенциальных кривых. Аналогичная методика использована для расчета радиационных параметров димеров переходных металлов (Cu_2 , Ag_2 , Au_2) [6]. Сравнение результатов расчета радиационных параметров с экспериментальными данными показало эффективность метода расчета. В данной работе аналогичные расчеты выполнены для переходов $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ (8850–7700 Å) и $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ (6950–6250 Å) молекулы $^{39}\text{K}_2$. Экспериментальные исследования электронных спектров переходов $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ и $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ димера калия проводились с использованием лазерных методик и спектральной техники высокого разрешения в работах [7, 8]. В результате спектральных исследований были определены точные значения молекулярных постоянных для основного и возбужденных электронных состояний.

Построение потенциальных кривых. При построении потенциальных кривых для основного и возбужденных состояний K_2 , также как и для других димеров щелочных и переходных металлов, применялась гибридная модель, состоящая из трех потенциальных функций. Нижняя часть потенциальной кривой аппроксимирована потенциальной 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, ρ, b_n — параметры потенциальной функции ВМ.

В средней части потенциальной кривой 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. Участок изменения межъядерного расстояния для этой части потенциальной кривой расположен между поворотными точками, которым соответствуют минимальное и максимальное экспериментальные значения колебательной энергии. Область потенциальной кривой при больших значениях межъядерного расстояния аппроксимирована функцией

$$U(r) = D_e - \sum \frac{C_n}{r^n}, \quad (2)$$

где D_e — энергия диссоциации, C_n — параметры функции (2).

Пороговые точки потенциальных кривых РКР для $X^1\Sigma^+g$, $A^1\Sigma^+u$, $B^1\Pi_u$ электронных состояний димера калия

v	$X^1\Sigma^+g$				$A^1\Sigma^+u$				$B^1\Pi_u$			
	$E_v^{\text{эксп}}, \text{см}^{-1}$	$10^2 B_v^{\text{эксп}}, \text{см}^{-1}$	$R_{\text{мин}}, \text{Å}$	$R_{\text{макс}}, \text{Å}$	$E_v^{\text{эксп}}, \text{см}^{-1}$	$10^2 B_v^{\text{эксп}}, \text{см}^{-1}$	$R_{\text{мин}}, \text{Å}$	$R_{\text{макс}}, \text{Å}$	$E_v^{\text{эксп}}, \text{см}^{-1}$	$10^2 B_v^{\text{эксп}}, \text{см}^{-1}$	$R_{\text{мин}}, \text{Å}$	$R_{\text{макс}}, \text{Å}$
0	46,094	5,608	3,7922	4,0662	35,193	4,154	4,4088	4,7225	37,342	4,811	4,0899	4,3944
2	228,927	5,565	3,6406	4,2572	175,212	4,130	4,2333	4,9373	185,123	4,763	3,9241	4,6103
4	409,116	5,521	3,5529	4,3852	313,989	4,106	4,1311	5,0792	330,163	4,714	3,8291	4,7571
6	586,628	5,476	3,4864	4,4930	451,517	4,082	4,0533	5,1971	472,383	4,662	3,7576	4,8822
8	761,427	5,429	3,4316	4,5901	587,790	4,057	3,9891	5,3021	611,700	4,609	3,6991	4,9962
10	933,474	5,381	3,3845	4,6806	722,802	4,032	3,9337	5,3986	748,019	4,553	3,6492	5,1039
12	1102,724	5,332	3,3429	4,7668	856,546	4,006	3,8846	5,4893	881,235	4,495	3,6054	5,2078
14	1269,131	5,281	3,3057	4,8500	989,017	3,981	3,8405	5,5757	1011,231	4,433	3,5664	5,3097
16	1432,642	5,228	3,2718	4,9312	1120,208	3,955	3,8003	5,6587	1137,875	4,368	3,5313	5,4107
18	1593,201	5,173	3,2408	5,0110	1250,113	3,928	3,7632	5,7391	1261,019	4,300	3,4993	5,5121
20	1750,744	5,116	3,2122	5,0900	1378,725	3,902	3,7289	5,8174	1380,497	4,227	3,4702	5,6146
22	1905,202	5,057	3,1857	5,1688	1506,039	3,875	3,6968	5,8939	1496,120	4,149	3,4433	5,7192
24	2056,500	4,995	3,1610	5,2476	1632,047	3,848	3,6667	5,9691	1607,675	4,065	3,4186	5,8270
26	2204,557	4,930	3,1379	5,3269	1756,744	3,820	3,6383	6,0432	1714,916	3,975	3,3959	5,9391
28	2349,283	4,863	3,1163	5,4070	1880,123	3,793	3,6114	6,1163	1817,560	3,877	3,3750	6,0567
30	2490,581	4,793	3,0960	5,4882	2002,179	3,764	3,5860	6,1888	1915,274	3,771	3,3557	6,1816

Параметры потенциалов ВМ и поворотные точки потенциальных кривых РКР рассчитаны по ранее описанным программам [9, 10]. Для расчета параметров потенциальных функций ВМ и РКР были использованы экспериментальные колебательные и вращательные молекулярные постоянные K_2 . Параметры функции (2) получены методом наименьших квадратов с помощью поворотных точек r_{\max} потенциальных кривых РКР и экспериментальных значений энергий диссоциации. В табл. 1 и 2 приведены результаты расчета поворотных точек потенциальных кривых РКР, параметров потенциалов ВМ и функций (2) для состояний $X^1\Sigma_g^+$, $A^1\Sigma_u^+$ и $B^1\Pi_u$ димера калия. Рассчитанные в данной работе поворотные точки РКР хорошо согласуются с поворотными точками из работ [7, 8]. Различия не превышают $0,0001 \text{ \AA}$.

На рис. 1 приведены построенные по рассчитанным параметрам гибридные потенциальные кривые основного и возбужденных электронных состояний K_2 . Надежность построенных потенциалов состояний $X^1\Sigma_g^+$, $A^1\Sigma_u^+$ и $B^1\Pi_u$ была подтверждена сравнением рассчитанных колебательных энергий, вращательных и центробежных постоянных с экспериментальными данными. Колебательные энергии найдены в результате численного решения радиального волнового уравнения на

Таблица 2

Параметры потенциальных функций ВМ и (2) для $X^1\Sigma_g^+$, $A^1\Sigma_u^+$ и $B^1\Pi_u$ -электронных состояний K_2

b_n	$X^1\Sigma_g^+$	$A^1\Sigma_u^+$	$B^1\Pi_u$
b_4	-0,272630	-0,09163	-0,235524
b_5	-0,068277	-0,07869	-0,281671
b_6	-0,065317	-0,03282	-0,451449
b_7	-0,577995	-0,00921	1,693496
b_8	0,080377	-0,01172	4,643771
b_9	1,088977	0,004708	-18,0868
b_{10}	-0,526256	-0,01448	-47,8062
b_{11}	-1,077379	0,009234	-
b_{12}	1,252279	-0,015522	-
b_{13}	-0,387686	0,012906	-
$V_e, \text{ см}^{-1}$	9179,7155	9152,997	5794,9278
$\rho, \text{ \AA}$	2,0348783	1,80578	2,2399994
$D_e, \text{ см}^{-1}$	4447,0	6378,0	2113,0
$C_6, \text{ см}^{-1} \cdot \text{ \AA}^6$	3,7614(8)	4,7172(8)	2,7917(8)
$C_8, \text{ см}^{-1} \cdot \text{ \AA}^8$	-6,4105(10)	1,5773(10)	1,8568(10)
$C_{10}, \text{ см}^{-1} \cdot \text{ \AA}^{10}$	2,7944(12)	1,0659(12)	2,8584(11)

основе построенных потенциальных кривых. Расчет вращательных и центробежных постоянных проведен по теории возмущений для модели вращающегося осциллятора двухатомной молекулы [11]. В табл. 3 приведены результаты сравнения рассчитанных колебательных энергий и вращательных молекулярных постоянных с экспериментальными величинами. На рис. 2 и 3 приведены результаты расчета центробежных постоянных. Рассчитанные на основе полуэмпирических потенциальных кривых колебательные энергии, вращательные и центробежные постоянные аппроксимированы степенными функциями, параметры которых являются молекулярными постоянными

$$E_v = \omega_e(v + 0,5) - \omega_e x_e(v + 0,5)^2 + \dots, \quad (3)$$

$$B_v = B_e - \alpha_e(v + 0,5) + \gamma_e(v + 0,5)^2 + \dots, \quad (4)$$

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

$$H_v = H_e - \xi_e(v + 0,5) + \epsilon_e(v + 0,5)^2 + \dots \quad (6)$$

Полученные из оптимальных аппроксимирующих функций молекулярные постоянные приведены в табл. 4 и сравниваются с экспериментальными значениями. Для сопоставления с полученными результатами значения центробежных постоянных D_e и H_e также были рассчитаны с использованием экспериментальных колебательных и вращательных постоянных по эмпирическим соотношениям Кратцера [12]

$$D_e = \frac{4B_e^3}{\omega_e^2} \quad (7)$$

и Кэмбла и др. [13]

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

Рассчитанные по соотношениям (7) и (8) центробежные постоянные приведены в табл. 4.

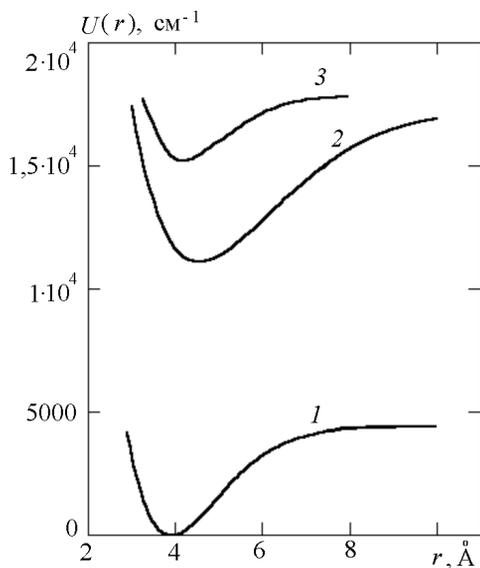


Рис. 1. Потенциальные кривые для основного $X^1\Sigma_g^+$ (1) и возбужденных $A^1\Sigma_u^+$ (2), $B^1\Pi_u$ (3) электронных состояний молекулы $^{39}\text{K}_2$

Сравнение колебательных энергий и вращательных молекулярных постоянных, рассчитанных на основе потенциальных кривых с экспериментальными величинами для $X^1\Sigma^+_g$, $A^1\Sigma^+_u$ и $B^1\Pi_u$ состояний K_2 .

v	$X^1\Sigma^+_g$				$A^1\Sigma^+_u$				$B^1\Pi_u$			
	$E^{\text{расч}}_{B_v}$	$10^2 \cdot B^{\text{расч}}_v$	$10^3 \cdot \delta E_v$	$10^5 \cdot \delta B_v$	$E^{\text{расч}}_{B_v}$	$10^2 \cdot B^{\text{расч}}_v$	$10^3 \cdot \delta E_v$	$10^5 \cdot \delta B_v$	$E^{\text{расч}}_{B_v}$	$10^2 \cdot B^{\text{расч}}_v$	$10^3 \cdot \delta E_v$	$10^5 \cdot \delta B_v$
0	46,094	5,608	0	0	35,193	4,154	0	0	37,342	4,812	0	0
2	228,925	5,565	-2	0	175,212	4,130	0	0	185,121	4,764	2	-1
4	409,115	5,521	1	0	313,989	4,106	0	0	330,161	4,715	2	-1
6	586,627	5,476	1	0	451,517	4,082	0	-1	472,381	4,663	2	-1
8	761,426	5,430	1	-1	587,790	4,057	0	-1	611,698	4,610	2	-1
10	933,472	5,382	2	-1	722,802	4,032	-1	-1	748,016	4,554	3	-1
12	1102,723	5,332	1	0	856,546	4,006	0	0	881,232	4,495	3	-1
14	1269,130	5,281	1	0	989,017	3,981	0	-1	1011,227	4,434	4	-1
16	1432,642	5,228	0	0	1120,208	3,955	-1	-1	1137,870	4,369	5	-1
18	1593,201	5,173	0	0	1250,113	3,928	-1	0	1261,014	4,300	5	-1
20	1750,744	5,116	0	0	1378,725	3,902	0	-1	1380,491	4,227	6	-1
22	1905,203	5,057	-1	0	1506,039	3,875	0	-1	1496,113	4,149	7	0
24	2056,502	4,995	-2	0	1632,047	3,848	0	-1	1607,666	4,066	9	-1
26	2204,560	4,931	-3	-1	1756,744	3,820	1	0	1714,904	3,976	12	-1
28	2349,287	4,863	-4	0	1880,123	3,793	2	0	1817,541	3,878	19	-1
30	2490,585	4,793	-4	0	2002,179	3,764	2	0	1915,242	3,772	32	-1

Примечание. $\delta E_v = E^{\text{расч}}_v - E_v$; $\delta B_v = B^{\text{расч}}_v - B_v$. Молекулярные постоянные даны в см^{-1} .

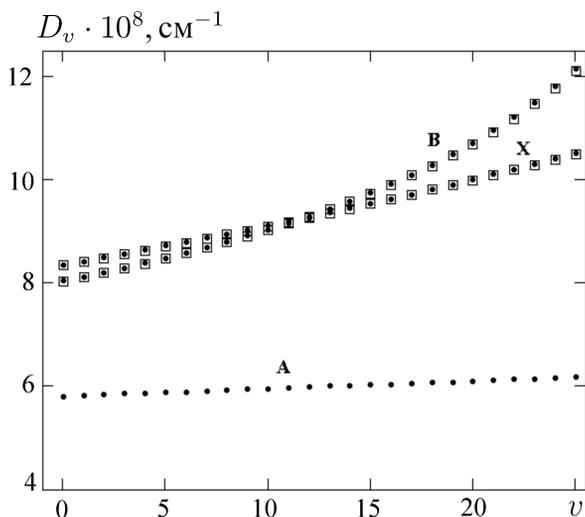


Рис. 2. Результаты расчета (обозначены точками) центробежных постоянных D_v для электронных состояний $X^1\Sigma_g^+$, $A^1\Sigma_u^+$ и $B^1\Pi_u$ молекулы $^{39}\text{K}_2$; \square — экспериментальные данные

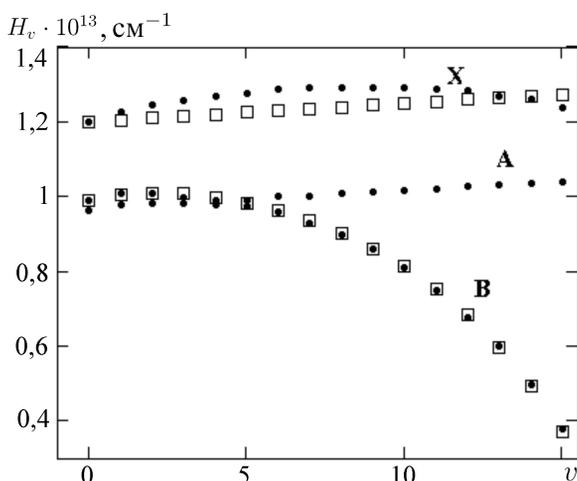


Рис. 3. Результаты расчета (обозначены точками) центробежных постоянных H_v для электронных состояний $X^1\Sigma_g^+$, $A^1\Sigma_u^+$ и $B^1\Pi_u$ молекулы $^{39}\text{K}_2$; \square — экспериментальные данные

Расчет радиационных параметров. Расчет радиационных параметров для переходов $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ и $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ переходов проведен на основе полуэмпирических потенциальных кривых комбинирующих электронных состояний. Коэффициент Эйнштейна для спонтанного излучения вращательной линии $A_{v'',j''}^{v',j'}$ (с^{-1}) и сила осциллятора для поглощения $(f_{v'',j''}^{v',j'})_{\text{полг}}$ (безразмерная величина) связаны с зависимостью дипольного момента электронного перехода от межъядерного

Результаты расчета молекулярных постоянных (см⁻¹) для электронных состояний $X^1\Sigma_g^+$, $A^1\Sigma_u^+$ и $B^1\Pi_u$ молекулы $^{39}\text{K}_2$

Молекулярные постоянные	$X^1\Sigma_g^+$	$A^1\Sigma_u^+$	$B^1\Pi_u$
ω_e	92,3980 92,3985	70,4732 70,4732	74,891 74,891
$\omega_e x_e$	0,3256 0,3257	0,1543 0,1543	0,3294 0,3274
$\omega_e y_e$	6,072(-4) 6,043(-4)	-1,310(-4) -1,309(-4)	-2,83(-3) -2,86827(-3)
$\omega_e z_e$	-5,084(-6) -5,124(-6)	- -	2,97(-4) 2,6807(-4)
B_e	0,05621 0,05619	0,04160 0,04160	0,04823 0,04822
α_e	2,14(-4) 2,11(-4)	1,181(-4) 1,187(-4)	2,315(-4) 2,310(-4)
γ_e	-1,00(-6) -1,25(-6)	3,82(-7) 3,67(-7)	-2,31(-7) -2,4163(-7)
D_e	8,323(-8) 8,314(-8) 8,312(-8)*	5,805(-8) - 5,798(-8)*	8,020(-8) 7,992(-8) 7,998(-8)*
β_e	7,02(-10) 6,77(-10)	1,501(-10) -	6,02(-10) 8,90(-10)
H_e	1,13(-13) 1,20(-13) 1,19(-13)**	0,966(-13) - 0,965(-13)**	0,963(-13) 0,979(-13) 1,008(-13)**

Примечание. Строка 1 — расчет на основе потенциальных кривых; строка 2 — экспериментальные данные: для $X^1\Sigma_g^+$, $B^1\Pi_u$ [25], $A^1\Sigma_u^+$ [24]; * — расчет по соотношению Кратцера с использованием экспериментальных колебательных и вращательных постоянных; ** — расчет по соотношению Кэмбла с использованием экспериментальных колебательных и вращательных постоянных.

расстояния $D_e(r)$ (а.е.) и определяются выражениями [14]

$$A_{v''',j''}^{v',j'} = 2,026 \cdot 10^{-6} \frac{(\nu_{v',j''}^{v',j'})^3 (2 - \delta_{0,\Lambda'+\Lambda''})}{(2 - \delta_{0,\Lambda''})} \times \\ \times [\langle \psi_{v',j'}(r) | D_e(r) | \psi_{v'',j''}(r) \rangle]^2 \times \frac{S_{j',j''}}{2j'' + 1}, \quad (9)$$

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

где $\delta_{0,\Lambda}$ — символ Кронекера, равный 1, если $\Lambda = 0$, и нулю для других значений проекции орбитального момента количества движения электронов на межъядерную ось молекулы; $\nu_{v'',j''}^{v',j'}$ — волновое число вращательной линии электронно-колебательно-вращательного 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; $2j + 1$ — степень вырождения по магнитному квантовому числу вращательного уровня энергии.

Важной радиационной характеристикой электронного перехода является фактор Франка–Кондона (ФФК), который определяет относительную вероятность радиационного перехода. Для вращательной линии электронного перехода ФФК определяется соотношением

$$q_{v'',j''}^{v',j'} = \left| \int_0^\infty \psi_{v',j'}(r) \psi_{v'',j''}(r) dr \right|^2. \quad (11)$$

Для расчета волновых чисел вращательных линий переходов $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ и $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ использовалось выражение

$$\nu_{v'',j''}^{v',j'} = T'_e + E'_{v,j} - E''_{v,j}, \quad (12)$$

где T'_e — электронная энергия возбужденного состояния; $E'_{v,j}$, $E''_{v,j}$ — колебательные энергии с учетом вращения молекулы для комбинирующих электронных состояний.

При расчете волновых чисел использовались экспериментальные значения $T'_e(A^1\Sigma_u^+)$ и $T'_e(B^1\Pi_u)$ [7, 8]. Значения $E'_{v,j}$, $E''_{v,j}$ и соответствующие им волновые функции $\psi_{v',j'}(r)$, $\psi_{v'',j''}(r)$ получены в результате численного решения радиального волнового уравнения

$$-\frac{h}{8\pi^2 c \mu} \frac{d^2 \psi_{v,j}(r)}{dr^2} + \left[U(r) + \frac{h}{8\pi^2 \mu c} \frac{j(j+1)}{r^2} \right] \psi_{v,j}(r) = E_{v,j} \psi_{v,j}(r), \quad (13)$$

где μ — приведенная масса молекулы.

Радиационные времена жизни колебательно-вращательных уровней состояния $A^1\Sigma_u^+$ рассчитаны с использованием коэффициентов Эйнштейна для вращательных линий R- и P-ветвей перехода $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$:

$$\tau_{v',j'} = \left[\sum_{v''=0} A_{v'',j''=j'-1}^{v',j'} + \sum_{v''=0} A_{v'',j''=j'+1}^{v',j'} \right]^{-1}. \quad (14)$$

Значения $\tau_{v',j'}$ для состояния $B^1\Pi_u$ рассчитаны с использованием коэффициентов Эйнштейна для вращательных линий Q-ветви пере-

хода $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$:

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

Расчет $A_{v'',j''}^{v',j'}$, $(f_{v',j'}^{v',j'})^{\text{погл}}$, $q_{v'',j''}^{v',j'}$, $\nu_{v'',j''}^{v',j'}$ и $\tau_{v',j'}$ проведен по соотношениям (9)–(15). При расчете $(f_{v',j'}^{v',j'})^{\text{погл}}$ и $A_{v'',j''}^{v',j'}$ перехода $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ использована зависимость $D_e(r) = \sqrt{S_e(r)}$, где $S_e(r)$ – сила электронного перехода, полученная из анализа интенсивностей в спектре лазерно-индуцированной флуоресценции [15]. Так как данные о зависимости $S_e(r)$ для перехода $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ димера калия в литературе отсутствуют, то для оценки этой зависимости использовались соотношения между силами осцилляторов переходов $A - X$, $B - X$ в димерах щелочных металлов и силами осцилляторов переходов $nS - nP$ в атомах щелочных металлов [16]

$$\begin{aligned} F(A - X) + F(B - X) &= 2F(nS - nP); \\ F(B - X)/F(A - X) &= 2. \end{aligned} \quad (16)$$

Эти соотношения получены на основе анализа квантово-механических расчетов и экспериментальных данных для димеров щелочных металлов. С использованием соотношения (16) и значения силы осциллятора атомного перехода К $F(4S - 4P) = 1,031$ а.е., взятого из справочника [17], рассчитано значение силы осциллятора перехода $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ молекулы K_2 , $F(A - X) = 0,687$ а.е. Сила осциллятора далее использовалась для расчета силы перехода $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ по соотношению [18]

$$S_e(r) = \frac{3he^2F(A - X)}{8\pi^2mc \sum_{v'} q_{v',v''} \nu_{v',v''}^{v',v''}}. \quad (17)$$

Была получена средняя величина силы перехода по пяти прогрессиям полос ($v'' = 0, 1, 2, 3, 4$) $S_e(r) = (19,24 \pm 0,08)$ а.е. для интервала межатомного расстояния $3,54 \dots 4,57 \text{ \AA}$.

В работе [19] приводится оценка значения силы перехода $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ молекулы K_2 , $S_e = 20$ а.е., которая хорошо согласуется со значением, полученным в данной работе. Для молекулы Cs_2 в результате анализа спектра перехода $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ было определено экспериментальное значение силы электронного перехода $S_e(r) = (27,9 \pm 1,2)$ а.е. и проведена оценка по соотношениям (16) и (17), которая дала результат $S_e(r) = (25,7 \pm 0,3)$ а.е., хорошо согласующийся с экспериментальным значением [20].

В данной работе были рассчитаны радиационные параметры для переходов $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ ($0 \leq v' \leq 20$, $j' = 0, 30, 50, 80, 100$;

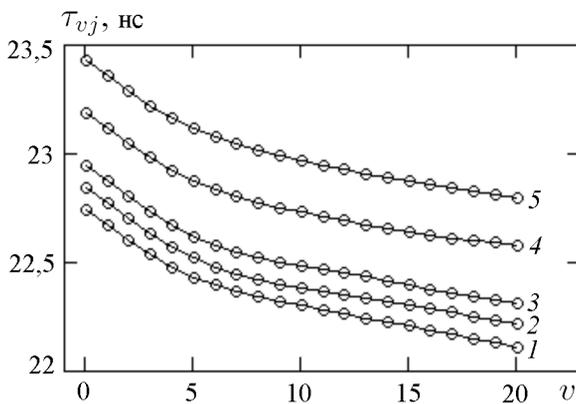


Рис. 4. Результаты расчета радиационных времен жизни колебательно-вращательных уровней $A^1\Sigma_u^+$ -состояния $^{39}\text{K}_2$:

$j = 0$ (1); $j = 30$ (2); $j = 50$ (3); $j = 80$ (4); $j = 100$ (5)

$0 \leq v'' \leq 40$) и $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ ($0 \leq v' \leq 20$, $j' = 0, 43, 59, 61, 80, 100$; $0 \leq v'' \leq 25$), а также радиационные времена жизни возбужденных состояний. Из-за громоздкости рассчитанных массивов радиационных параметров приведена только часть полученных результатов. В табл. 5 представлены результаты расчета $A_{v'',j''}^{v',j'}$, $(f_{v'',j''}^{v',j'})_{\text{полг}}$, $q_{v'',j''}^{v',j'}$, $\nu_{v'',j''}^{v',j'}$ для вращательных линий R- и P-ветвей перехода $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ ($v' = 10$, $j' = 50$; $0 \leq v'' \leq 29$). В табл. 6 приведены результаты расчета радиационных параметров для вращательных линий Q-ветви ($j' = 43$) перехода $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ молекулы K_2 . На рис. 4 и 5 приведены результаты расчета времен жизни колебательно-вращательных уровней $A^1\Sigma_u^+$ и $B^1\Pi_u$ состояний.

Обсуждение результатов и заключение. Адекватность построенных потенциальных кривых для основного и возбужденных электронных состояний димера калия подтверждена хорошо согласующимися, рассчитанными на их основе и экспериментальными молекулярными постоянными (см. табл. 4). Экспериментальные и теоретические значения радиационных параметров для перехода $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ в литературе отсутствуют. Рассчитанные в данной работе радиационные параметры представлены в табл. 5 и на рис. 4. Как видно из рисунка, радиационные времена жизни $A^1\Sigma_u^+$ состояния слабо зависят как от колебательного, так и вращательного квантового числа. При возрастании колебательного квантового числа от $v = 0$ до $v = 20$ время жизни уменьшается на $\sim 0,6$ нс ($\sim 3\%$). При изменении вращательного квантового числа от $j = 0$ до $j = 100$ время жизни уменьшается на $\sim 0,7$ нс. В табл. 6 и на рис. 5 приведены радиационные параметры и радиационные времена жизни возбужденного состояния для перехода $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$, рассчитанные в данной работе. В работе [21] были измерены волновые числа вращательных линий Q-ветвей ($v' = 8, 11, 18$;

Таблица 5
Результаты расчета радиационных параметров для вращательных линий R- и P-ветвей электронного перехода $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ ($v' = 10, j' = 50; v'', j'' = 49, 51$) молекулы $^{39}\text{K}_2$

v''	Для линий R-ветви				Для линий P-ветви			
	$\nu_{v'', j''}^{v', j'}$, см^{-1}	$q_{v'', j''}^{v', j'}$	$A_{v'', j''}^{v', j'} \cdot 10^{-6}$, с^{-1}	$(f_{v'', j''}^{v', j'})_{\text{полн}} \cdot 10^3$	$\nu_{v'', j''}^{v', j'}$, см^{-1}	$q_{v'', j''}^{v', j'}$	$A_{v'', j''}^{v', j'} \cdot 10^{-6}$, с^{-1}	$(f_{v'', j''}^{v', j'})_{\text{полн}} \cdot 10^3$
0	11750,6	0,1058	3,380	37,44	11739,4	0,1061	3,446	36,77
1	11659,4	0,0037	0,114	1,29	11648,2	0,0032	0,102	1,11
2	11568,9	0,0483	1,466	16,75	11557,7	0,0490	1,514	16,67
3	11479,0	0,0132	0,391	4,54	11467,8	0,0123	0,370	4,13
4	11389,8	0,0244	0,707	8,34	11378,7	0,0255	0,752	8,54
5	11301,2	0,0267	0,754	9,02	11290,2	0,0256	0,736	8,49
6	11213,4	0,0064	0,178	2,16	11202,4	0,0073	0,206	2,41
7	11126,2	0,0363	0,978	12,09	11115,2	0,0359	0,983	11,70
8	11039,7	0,0001	0,004	0,05	11028,8	0,0001	0,009	0,01
9	10954,0	0,0321	0,826	10,53	10943,1	0,0329	0,860	10,56
10	10868,9	0,0114	0,284	3,71	10858,1	0,0102	0,261	3,25
11	10784,5	0,0138	0,338	4,45	10777,8	0,0151	0,378	4,78
12	10700,9	0,0308	0,737	9,84	10607,3	0,0298	0,727	9,35
13	10617,9	0,0001	0,002	0,02	10525,1	0,0003	0,006	0,08
14	10535,7	0,0332	0,760	10,48	10525,1	0,0341	0,793	10,52

ψ''	Для линий R-ветви				Для линий P-ветви			
	$\nu_{\psi'', \beta'', \gamma''}^{v, j'}$, см ⁻¹	$q_{\psi'', \beta'', \gamma''}^{v, j'}$	$A_{\psi'', \beta'', \gamma''}^{v, j'}$ · 10 ⁻⁶ , с ⁻¹	$(f_{\psi'', \beta'', \gamma''}^{v, j'})_{\text{полн}}$ · 10 ³	$\nu_{\psi'', \beta'', \gamma''}^{v, j'}$, см ⁻¹	$q_{\psi'', \beta'', \gamma''}^{v, j'}$	$A_{\psi'', \beta'', \gamma''}^{v, j'}$ · 10 ⁻⁶ , с ⁻¹	$(f_{\psi'', \beta'', \gamma''}^{v, j'})_{\text{полн}}$ · 10 ³
15	10454,2	0,0134	0,299	4,18	10443,7	0,0119	0,270	3,64
16	10373,5	0,0106	0,231	3,28	10363,0	0,0121	0,270	3,69
17	10293,6	0,0385	0,822	11,86	10283,1	0,0380	0,824	11,45
18	10214,3	0,0025	0,051	0,75	10203,9	0,0017	0,035	0,49
19	10135,9	0,0265	0,541	8,05	10125,6	0,0286	0,592	8,49
20	10058,2	0,0386	0,768	11,61	10047,9	0,0371	0,749	10,91
21	9981,3	0,0001	0,003	0,04	9971,1	0,0001	0,000	0,00
22	9905,2	0,0399	0,760	11,85	9895,1	0,0426	0,823	12,36
23	9829,9	0,0522	0,968	15,32	9819,8	0,0502	0,947	14,43
24	9755,4	0,0018	0,032	0,52	9745,4	0,0009	0,017	0,26
25	9681,8	0,0453	0,805	13,13	9671,8	0,0501	0,906	14,24
26	9609,0	0,1354	2,349	38,92	9599,1	0,1383	2,439	38,92
27	9537,0	0,1310	2,220	37,33	9527,2	0,1284	2,212	35,84
28	9465,9	0,0621	1,028	17,55	9465,9	0,0587	0,988	16,25
29	9395,7	0,0149	0,240	4,17	9386,0	0,0135	0,222	3,70

Результаты расчета радиационных параметров для вращательных линий Q-ветви ($j' = 43$) перехода $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ молекулы $^{39}\text{K}_2$

v'	$v'' = 0$	$v'' = 1$	$v'' = 2$	$v'' = 3$	$v'' = 4$	$v'' = 5$	$v'' = 6$	$v'' = 7$	$v'' = 8$	$v'' = 9$
0	9.62(-2) 8.20(+6) 1.04(-1) 15352.5	2.39(-1) 2.00(+7) 2.58(-1) 15261.2	2.86(-1) 2.35(+7) 3.6(-1) 15170.5	2.17(-1) 1.75(+7) 2.32(-1) 15080.5	1.17(-1) 9.31(+6) 1.24(-1) 14991.1	4.78(-2) 3.73(+6) 5.04(-2) 14902.5	1.52(-2) 1.16(+6) 1.59(-2) 14815.3	3.85(-3) 2.90(+5) 4.00(-3) 14727.9	7.9(-4) 5.83(+4) 8.16(-4) 14641.4	1.3(-4) 9.54(+3) 1.35(-4) 14555.5
1	2.12(-1) 1.83(+7) 2.30(-1) 15426.3	1.77(-1) 1.50(+7) 1.92(-1) 15334.9	1.23(-2) 1.02(+6) 1.32(-2) 15244.3	5.08(-2) 4.17(+6) 5.44(-2) 15154.2	1.74(-1) 1.40(+7) 1.85(-1) 15064.9	1.92(-1) 1.52(+7) 2.04(-1) 14976.2	1.24(-1) 9.61(+6) 1.30(-1) 14888.3	1.83(-2) 4.19(+6) 5.72(-2) 14800.9	1.80(-2) 1.59(+6) 1.87(-2) 14715.2	4.559(-3) 3.36(+5) 4.70(-3) 14629.2
2	2.47(-1) 2.17(+7) 2.70(-1) 15500.2	2.07(-2) 1.78(+6) 2.26(-2) 15408.8	7.76(-2) 6.57(+6) 8.40(-2) 15318.1	1.27(-1) 1.05(+7) 1.36(-1) 15228.1	1.28(-2) 1.04(+6) 1.37(-2) 15138.8	4.02(-2) 3.23(+6) 4.28(-2) 15050.1	1.52(-1) 1.20(+7) 1.60(-1) 14962.2	1.70(-1) 1.32(+7) 1.78(-1) 14874.8	1.08(-1) 8.20(+6) 1.12(-1) 14788.2	4.61(-2) 3.45(+6) 4.78(-2) 14702.3
3	2.04(-1) 1.81(+7) 2.24(-1) 15572.6	1.90(-2) 1.66(+6) 2.08(-2) 15481.2	1.25(-1) 1.07(+7) 1.36(-1) 15390.5	2.05(-3) 173(+5) 2.22(-3) 15300.5	8.40(-2) 6.97(+6) 9.04(-2) 15211.2	9.03(-2) 7.35(+6) 9.64(-2) 15122.5	1.74(-3) 1.39(+5) 1.85(-3) 15034.6	6.02(-2) 4.73(+6) 6.36(-2) 14947.2	1.55(-1) 1.20(+7) 1.63(-1) 14860.6	1.49(-1) 1.13(+7) 1.55(-1) 14774.7
4	1.33(-1) 1.20(+7) 1.47(-1) 15644.2	1.01(-1) 8.96(+6) 1.11(-1) 15552.9	3.46(-2) 3.02(+6) 3.78(-2) 15462.2	6.24(-2) 5.33(+6) 6.76(-2) 15372.2	6.76(-2) 5.68(+6) 7.30(-2) 15282.9	6.82(-3) 5.65(+5) 7.34(-3) 15194.2	9.92(-2) 8.06(+6) 1.06(-1) 15106.2	4.91(-2) 3.92(+6) 5.20(-2) 15018.9	3.97(-3) 3.11(+5) 4.18(-3) 14932.3	9.49(-2) 7.32(+6) 9.96(-2) 14846.4

v'	$v'' = 0$	$v'' = 1$	$v'' = 2$	$v'' = 3$	$v'' = 4$	$v'' = 5$	$v'' = 6$	$v'' = 7$	$v'' = 8$	$v'' = 9$
5	7.29(-2) 6.67(+6) 8.10(-2) 15715.2	1.46(-1) 1.31(+7) 1.61(-1) 15623.9	2.64(-3) 2.34(+5) 2.90(-3) 15533.2	9.62(-2) 8.34(+6) 1.05(-1) 15443.2	7.10(-4) 5.98(+4) 7.60(-4) 15353.9	8.87(-2) 7.45(+6) 9.58(-2) 15265.2	1.55(-2) 1.27(+6) 1.65(-2) 15177.2	4.23(-2) 3.42(+6) 4.50(-2) 15089.9	9.13(-2) 7.26(+6) 9.68(-2) 15003.3	1.14(-2) 8.94(+5) 1.21(-2) 14917.4
6	3.50(-2) 3.24(+6) 3.90(-2) 15785.5	1.32(-1) 1.20(+7) 1.46(-2) 15694.2	5.63(-2) 5.04(+6) 6.22(-2) 15603.5	3.00(-2) 2.63(+6) 3.28(-2) 15513.5	6.31(-2) 5.44(+6) 6.86(-2) 15424.1	2.84(-2) 2.43(+6) 3.10(-2) 15335.5	3.94(-2) 3.30(+6) 4.26(-2) 15247.5	6.30(-2) 5.16(+6) 6.74(-2) 15160.2	1.76(-3) 1.43(+5) 1.88(-3) 15073.6	8.11(-2) 6.42(+6) 8.58(-2) 14987.7
7	1.51(-2) 1.42(+6) 1.69(-2) 15855.0	9.02(-2) 8.33(+6) 1.01(-1) 15763.7	1.08(-1) 9.87(+6) 1.24(-1) 15672.9	1.04(-3) 9.63(+4) 1.19(-3) 15583.0	7.68(-2) 6.69(+6) 8.36(-2) 15493.6	8.49(-3) 7.18(+5) 9.06(-3) 15404.9	6.94(-2) 5.90(+6) 7.56(-2) 15317.0	1.33(-3) 1.12(+5) 1.45(-3) 15229.7	7.47(-2) 6.12(+6) 8.00(-2) 15143.1	1.31(-2) 1.04(+6) 1.38(-2) 15057.2
8	5.97(-3) 5.69(+5) 6.72(-3) 15923.8	5.13(-2) 4.81(+6) 5.76(-2) 15832.4	1.15(-1) 1.06(+7) 1.29(-1) 15741.8	4.13(-2) 3.77(+6) 4.62(-2) 15651.8	2.13(-2) 1.86(+6) 2.30(-2) 15562.4	6.51(-2) 5.62(+6) 7.04(-2) 15473.8	6.38(-3) 5.63(+5) 7.30(-3) 15385.8	6.14(-2) 5.20(+6) 6.65(-2) 15298.5	1.40(-2) 1.17(+6) 1.51(-2) 15211.9	4.27(-2) 3.51(+6) 4.60(-2) 15125.9
9	2.19(-3) 2.12(+5) 2.48(-3) 15991.8	2.54(-2) 2.42(+6) 2.88(-2) 15900.4	8.93(-2) 8.38(+6) 1.04(-1) 15809.8	8.83(-2) 8.18(+6) 9.92(-2) 15719.8	1.41(-3) 1.43(+5) 1.76(-3) 15630.4	6.05(-2) 5.24(+6) 6.52(-2) 15541.8	2.10(-2) 1.78(+6) 2.24(-2) 15453.8	4.09(-2) 3.52(+6) 4.48(-2) 15366.5	2.26(-2) 1.89(+6) 2.42(-2) 15279.9	4.80(-2) 4.01(+6) 5.20(-2) 15193.9

П р и м е ч а н и е. Первая строка — $q_{v''}^{v',j'}$; вторая строка — $A_{v''}^{v',j'}$ (с^{-1}); третья строка — $(f_{v''}^{v',j'})^{\text{полн}}$; четвертая строка — $v_{v''}^{v',j'}$, см^{-1} . Числа в скобках — десятичные показатели степени.

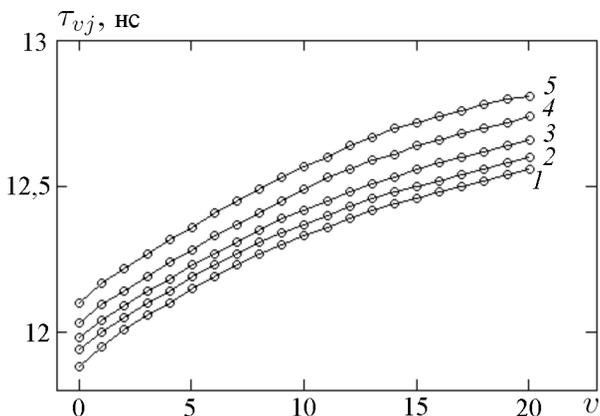


Рис. 5. Результаты расчета радиационных времен жизни колебательно-вращательных уровней $B^1\Pi_u$ -состояния $^{39}\text{K}_2$:

$j = 0$ (1); $j = 43$ (2); $j = 61$ (3); $j = 80$ (4); $j = 100$ (5)

$j' = 43, 59, 61$; $v'' \leq 32$) в спектре лазерно-индуцированной флуоресценции перехода $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ молекулы $^{39}\text{K}_2$. Рассчитанные в данной работе волновые числа вращательных линий в пределах экспериментальных погрешностей хорошо согласуются с измерениями в спектре. Экспериментальные измерения времени жизни состояния $B^1\Pi_u$ проводились разными методами в работах [22, 23]. В работе [22] использовали метод фазового сдвига. Было измерено среднее значение $\tau_v = 12,4 \pm 0,3$ нс для колебательных уровней $v = 6, 7$ и 8 , которое хорошо согласуется с результатами расчета данной работы (см. рис. 5). Расчеты $\tau_{v,j=0}$, выполненные в работе [22] для $v \leq 13$, хорошо согласуются с результатами настоящей работы. Различия не превышают 1%. В работе [23] для измерения времени жизни состояния $B^1\Pi_u$ использовали счетчик фотонов с высоким временным разрешением. Было определено среднее время жизни $\tau(B^1\Pi_u) = 12,2 \pm 0,2$ нс. Рассчитанное в настоящей работе среднее значение времени жизни состояния $B^1\Pi_u$ для $j' = 0$, $v' \leq 20$, равное $12,2 \pm 0,3$ нс, хорошо согласуется с измеренным значением.

В настоящей работе впервые получены коэффициенты Эйнштейна, силы осциллятора для электронного перехода $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ и радиационные времена жизни колебательно-вращательных уровней возбужденного состояния $^{39}\text{K}_2$. Так как при расчете времен жизни состояния $B^1\Pi_u$ использовались коэффициенты Эйнштейна, полученные в данной работе, то на основании хорошо согласующихся экспериментальных и рассчитанных времен жизни можно сделать вывод о надежности коэффициентов Эйнштейна.

Полные данные по рассчитанным радиационным параметрам и временам жизни возбужденных состояний для переходов $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ и $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ молекулы $^{39}\text{K}_2$ могут быть получены от автора.

1. Johnson D.E., Eden I.G. Continua in the visible absorption spectrum of K₂ // J. Opt. Soc. Am. 1985. Vol. 2. No. 5. P. 721–728.
2. Ветчинкин С. И., Уманский И.М. Диффузные полосы в $1^3\Sigma_u^+ - 2^3\Pi_g$ спектрах димеров щелочных металлов // Оптика и спектроскоп. 1991. Т. 72. С. 29–33.
3. Смирнов А.Д. Расчет спектроскопических постоянных и радиационных параметров для $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ и $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ электронных переходов димера натрия // Оптика и спектроскопия. 2010. Т. 109. № 5. С. 739–745.
4. Смирнов А.Д. Расчет радиационных параметров $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ электронного перехода димера цезия // Журн. прикл. спектроскоп. 2010. Т. 77. № 5. С. 661–667.
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 лития // Оптика и спектроскоп. 2012. Т. 113. № 4. С. 387–394.
6. Смирнов А.Д. Расчет радиационных параметров для димеров и смешанных димеров переходных металлов первой группы периодической таблицы элементов // Труды VI Всерос. конф. “Необратимые процессы в природе и технике”. - Москва, 2011. 364 с.
7. Heinze J., Schulte U., Engelke F., Caldwell C.D. Doppler-free polarization spectroscopy of the $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ band system of K₂ // J. Chem. Phys. 1987. Vol. 87. No. 1. P. 45–53.
8. Lyyra A.M., Luh W.T., Li L., Wang H., Stwalley W.C. The $A^1\Sigma_u^+$ state of the potassium dimer // J. Chem. Phys. 1990. Vol. 92. No 1. P. 43–52.
9. Смирнов А.Д. Потенциальные кривые основных электронных состояний димеров натрия, калия, цезия // Оптика и спектроскоп. 1996. Т. 81. № 3. С. 390–396.
10. Смирнов А.Д. Факторы Франка–Кондона и потенциальные кривые комбинирующих состояний $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ перехода димера цезия // Оптика и спектроскоп. 1995. Т. 78. № 4. С. 615–621.
11. Цюлике Л. Квантовая химия. Т. 1. Основы и общие методы / Пер. с нем. М.: Мир, 1976. 512 с.
12. Kratzer A. Die ultraroten rotationsspektren der halogenwasserstoffe // Z. Phys. 1920. Vol. 3. No. 5. P. 289–307.
13. Kemble E.C., Birge R.T., Colby W.F. et al. // Molecular Spectra in Gases. – National Research Council. Washington, D.C., 1930. P. 57.
14. Laher R.R., Khakoo M.A. Antic-Jovanovic A. Radiative transition parameters for the $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ band system of Ag₂ // J. Mol. Spectr. 2008. Vol. 248. P. 111–121.
15. Кузьменко Н.Е., Пирагс И.Я., Прытков С.Е., Столяров А.В., Фербер Р.С. Определение силы электронного перехода $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ системы димера калия ³⁹K₂ по интенсивностям лазерно-индуцированной флуоресценции // Известия Академии Наук Латвийской ССР. Серия физических и технических наук. 1987. № 4. С. 3–10.
16. Woerdman J.P. A note on the transition dipole moment of alkali dimers // J. Chem. Phys. 1981. Vol. 75. No. 11. P. 5577–5578.
17. Радциг А.А., Смирнов Б.М. Справочник по атомной и молекулярной физике. М., 1980. С. 240.
18. Kuznetsova L.A. Electronic transition strengths for diatomic molecules // Spectr. Lett. 1987. Vol. 20. No. 9. P. 665–723.
19. Кузнецова Л.А., Кузьменко Н.Е., Кузяков Ю.Я., Пластинин Ю.А. Вероятности оптических переходов двухатомных молекул. М., 1980. 320 с.
20. Смирнов А.Д. Сила электронного перехода $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ димера цезия // Журн. прикл. спектроскоп. 1993. Т. 59. № 5–6. С. 479–483.
21. Luh W.T., Zafiropulos V., Kleiber P.D., Stwalley W.C., Heneghan S. Fluorescence of Na₂ and K₂ excited by a gold vapor laser // J. Mol. Spectr. 1985. Vol. 111. P. 327–343.

22. *Tango W., Zare R.N.* Radiative lifetime of the $B^1\Pi_u$ state of K_2 // *J. Chem. Phys.* 1970. Vol. 53. No. 8. P. 3094–3100.
23. *Lemont S., Giniger R., Flynn G.W.* Radiative lifetime and quenching cross section of the $B^1\Pi_u$ state of K_2 by time correlated single photon counting using a mode-locked He–Ne laser // *J. Chem. Phys.* 1977. Vol. 66. P. 4509–4515.

REFERENCES

1. *Johnson D.E., Eden I.G.* Continua in the visible absorption spectrum of K_2 . *J. Opt. Soc. Am.*, 1985, vol. 2, no. 5, pp. 721–728.
2. *Vetchinkin S.I., Umanskii I.M.* Diffuse bands in $1^3\Sigma_u^+ - 2^3\Pi_g$ spectra of alkali metal dimers. *Opt. Spectrosc.*, 1991, vol. 72, no. 1, pp. 16–18.
3. *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 a sodium dimer. *Opt. Spectrosc.*, 2010, vol. 109, no. 5, pp. 680–686. doi: 10.1134/S0030400X10110068
4. *Smirnov A.D.* Calculation of radiative parameters for the $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ electronic transition of a cesium dimer. *J. Appl. Spectrosc.*, 2010, vol. 77, no. 5, pp. 595–608.
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 a lithium dimer. *Opt. Spectrosc.*, 2012, vol. 113, no. 4, pp. 387–394.
6. *Smirnov A.D.* Calculation of radiative parameters for dimers and mixed dimers of transition metals in the first group of the periodic table. *Trudy 6 Vseross. Konf. "Neobratimye protsessy v prirode i tekhnike"* [Proc. 6th All Russ. Conf. "Irreversible processes in nature and technology"]. Moscow, 2011, p. 364 (in Russ.).
7. *Heinze J., Schühle U., Engelke F., Caldwell C.D.* Doppler-free polarization spectroscopy of the $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ band system of K_2 . *J. Chem. Phys.*, 1987, vol. 87, no. 1, pp. 45–53.
8. *Lyyra A.M., Luh W.T., Li L., Wang H., Stwalley W.C.* The $A^1\Sigma_u^+$ state of the potassium dimer. *J. Chem. Phys.*, 1990, vol. 92, no. 1, pp. 43–52.
9. *Smirnov A.D.* Potential curves of the ground electronic states of dimers of sodium, potassium, and cesium. *Opt. Spectrosc.*, 1996, vol. 81, no. 3, pp. 352–357.
10. *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.*, 1995, vol. 78, no. 4, p. 615–621.
11. *Zülicke L.* Quantenchemie. Bd. 1. Grundlagen und allgemeine Methoden. Heidelberg, Hüthig, 1973, 517 p. (Russ. ed.: Tsyulike L. Kvantovaya khimiya. T. 1. Osnovy i obshchie metody. Moscow, Mir Publ., 1976. 512 p.).
12. *Kratzer A.* Die ultraroten rotationspektren der halogenwasserstoffe. *Z. Phys*, 1920, vol. 3, no. 5, pp. 289–307.
13. *Kemble E.C., Birge R.T., Colby W.F.* et al. Molecular Spectra in Gases. Lett. Natl. Res. Council, Washington, D.C., 1930, p. 57.
14. *Laher R.R., Khakoo M.A., Antic-Jovanovic A.* Radiative transition parameters for the $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ band system of Ag_2 . *J. Mol. Spectrosc.*, 2008, vol. 248, pp. 111–121.
15. *Kuz'menko H.E., Pirags I.Ya., Prytkov S.E., Stolyarov A.V., Ferber R.S.* Calculation of strength for the $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ electronic transition of the $^{39}K_2$ system of a potassium dimer with respect to laser induced fluorescence intensities. *Izv. Akad. Nauk Latvvijskoy SSR. Ser. Fiz. Tekh. Nauk* [Proc. Acad. Sci. Lithuanian SSR. Ser. Phys. Tech. Sci.], 1987, no. 4, pp. 3–10 (in Russ.).
16. *Woerdman J.P.* A note on the transition dipole moment of alkali dimers. *J. Chem. Phys.*, 1981, vol. 75, no. 11, pp. 5577–5578.
17. *Radtsig A.A., Smirnov B.M.* Spravochnik po atomnoy i molekulyarnoy fizike [Handbook on Atomic and Molecular Physics]. Moscow, 1980. 240 p.

18. Kuznetsova L.A. Electronic transition strengths for diatomic molecules. *Spectrosc. Lett.*, 1987, vol. 20, no. 9, pp. 665–723.
19. Kuznetsova L.A., Kuz'menko H.E., Kuzyakov Yu. Ya., Plastinin Yu.A. Veroyatnosti opticheskikh perekhodov dvukhatomnykh molekul [Optical transition probabilities for diatomic molecules]. Moscow, Nauka Publ., 1980. 320 p.
20. Smirnov A.D. Strength of the $A^1\Sigma^+_u - X^1\Sigma^+_g$ electronic transition of a cesium dimer. *J. Appl. Spectrosc.*, 1993, vol. 59, nos. 5–6, pp. 837–840.
21. Luh W.T., Zafirooulos V., Kleiber P.D., Stwalley W.C., Heneghan S. Fluorescence of Na_2 and K_2 excited by a gold vapor laser. *J. Mol. Spectrosc.*, 1985, vol. 111, pp. 327–343.
22. Tango W., Zare R.N. Radiative lifetime of the $B^1\Pi_u$ state of K_2 . *J. Chem. Phys.*, 1970, vol. 53, no. 8, pp. 3094–3100.
23. Lemont S., Giniger R., Flynn G.W. Radiative lifetime and quenching cross section of the $B^1\Pi_u$ state of K_2 by time correlated single photon counting using a mode-locked He-Ne laser. *J. Chem. Phys.*, 1977, vol. 66, pp. 4509–4515.

Статья поступила в редакцию 25.05.2012

Александр Давыдович Смирнов — канд. хим. наук, доцент кафедры “Химия” МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор более 60 научных работ в области квантовой химии и молекулярной спектроскопии.

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

A.D. Smirnov — Cand. Sci. (Chem.), assoc. professor of “Chemistry” department of the Bauman Moscow State Technical University. Author of more than 60 publications in the field of quantum chemistry and molecular spectroscopy.

Bauman Moscow State Technical University, Vtoraya Baumanskaya ul., 5, Moscow, 105005 Russia.