

УДК 539.194

РАСЧЕТ РАДИАЦИОННЫХ ПАРАМЕТРОВ КАТИОНОВ ДИМЕРОВ ЛИТИЯ, НАТРИЯ И КАЛИЯ

А.Д. Смирнов

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация
e-mail: adsmir@mail.ru

Рассчитаны радиационные параметры (коэффициенты Эйнштейна спонтанного излучения, силы осциллятора для поглощения, факторы Франка–Кондона, волновые числа электронно-колебательных переходов в системах полюс $(1)^2\Pi_u - X^2\Sigma_g^+$ молекулярных ионов Li_2^+ ($0 \leq v' \leq 25$, $0 \leq v'' \leq 64$), Na_2^+ ($0 \leq v' \leq 25$, $0 \leq v'' \leq 74$), K_2^+ ($0 \leq v' \leq 25$, $0 \leq v'' \leq 88$) и значения радиационного времени жизни возбужденных электронных состояний. Расчеты проведены на основе потенциальных кривых, построенных в настоящей работе. Необходимые для расчета радиационных параметров колебательные энергии и соответствующие волновые функции найдены в результате численного решения радиального волнового уравнения. Определенные значения радиационных параметров и времени жизни получены впервые.

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

CALCULATION OF RADIATIVE PARAMETERS FOR ALKALI-DIMER CATIONS OF LITHIUM, SODIUM AND POTASSIUM

A.D. Smirnov

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation
e-mail: adsmir@mail.ru

The author calculates radiative parameters (Einstein coefficients of spontaneous radiation, oscillator strengths for absorption, Frank–Condon factors, wave numbers of electronic-vibrational bandwidths in electronic transition $(1)^2\Pi_u - X^2\Sigma_g^+$ of molecular ions Li_2^+ ($0 \leq v' \leq 25$, $0 \leq v'' \leq 64$), Na_2^+ ($0 \leq v' \leq 25$, $0 \leq v'' \leq 74$), K_2^+ ($0 \leq v' \leq 25$, $0 \leq v'' \leq 88$) and radiative lifetimes of the excited electronic states. The calculations are performed on the basis of the potential energy curves presented in this paper. Necessary vibrational energies and respective wave functions were obtained in order to calculate the radiative parameters. It became possible due to finding a numerical solution of the radial wave equation. The radiative parameters and lifetimes are calculated for the first time ever.

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

За последние годы значительно увеличилось число экспериментальных и теоретических публикаций, связанных с получением гомо- и гетероядерных димеров щелочных металлов в основных и возбужденных электронных состояниях с помощью спектральной методики фотоассоциации холодных атомов [1–3]. Важность этих исследований

вызвана изучением динамики столкновения холодных частиц, проведением химических реакций при низких температурах. Для синтеза холодных димеров щелочных металлов из холодных атомов необходимы надежные данные о радиационных параметрах и времени жизни.

Значения радиационных параметров и времени жизни для гомоядерных димеров щелочных металлов (Li_2 , Na_2 , K_2 , Rb_2 , Cs_2) были рассчитаны в работах [4–8], значения радиационных параметров и времени жизни для гетероядерных димеров (NaK , NaRb , NaCs) — в работе [9]. Расчеты проводились квантово-химическим методом на основе потенциальных кривых. Сравнение результатов расчета с экспериментальными данными показало эффективность метода расчета.

В настоящей работе выполнены расчеты значений радиационных параметров для электронного перехода $(1)^2\Pi_u - X^2\Sigma_g^+$ катионов димеров лития, натрия и калия. Экспериментальные и теоретические исследования молекулярных ионов Li_2^+ , Na_2^+ , K_2^+ в целях получения молекулярных постоянных для основных и возбужденных электронных состояний проводились в ряде работ. В экспериментальных работах [10–12] были определены молекулярные постоянные для основных электронных состояний. Теоретические исследования осуществлялись различными квантово-химическими методами [13–19]. Были найдены молекулярные постоянные для основных и возбужденных состояний.

Построение потенциальных кривых. Для аппроксимации реальных потенциальных кривых основных и возбужденных электронных состояний использовалась пятипараметрическая потенциальная функция Гульберта – Гиршфельдера [20]:

$$V(r) = D_e[1 - \exp(-\beta q)]^2 + B\beta^3 q^3 \exp(-2\beta q(1 + C\beta q)),$$

где D_e — энергия диссоциации молекулы; $\beta = \frac{h}{8\pi^2 c \mu}$; $q = r - r_e$; r_e — равновесное межъядерное расстояние; μ — приведенная масса молекулы; B, C — параметры потенциальной функции.

Для построения потенциальных кривых основных и возбужденных электронных состояний катионов димеров лития Li_2^+ , натрия Na_2^+ и калия K_2^+ использовались экспериментальные, теоретические колебательные и вращательные молекулярные постоянные. Потенциальные кривые для основных и возбужденных состояний перечисленных катионов, построенные в настоящей работе, приведены на рис. 1.

Для проверки надежности построенных потенциальных кривых на их основе были рассчитаны колебательные энергии, вращательные и центробежные постоянные, а также проведено сравнение с имеющимися данными. Колебательные энергии найдены численным решением радиального волнового уравнения и рассчитаны до высоких значений

колебательных квантовых чисел. Для основных электронных состояний: $v_{\max}(\text{Li}_2^+) = 64$, энергия максимально рассчитанного колебательного уровня составляет 94 % значения экспериментальной энергии диссоциации; $v_{\max}(\text{Na}_2^+) = 74$ (81 %); $v_{\max}(\text{K}_2^+) = 88$ (76 %). Для возбужденных электронных состояний колебательные энергии рассчитаны для $v_{\max} = 25$. Расчет вращательных и центробежных постоянных проведен по теории возмущений для модели вращающегося осциллятора двухатомной молекулы [21].

Вычисленные на основе потенциальных кривых колебательные энергии, вращательные и центробежные постоянные для основных и возбужденных состояний аппроксимированы степенными функциями, параметры которых являются молекулярными постоянными

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

Молекулярные постоянные для основных и возбужденных электронных состояний катионов димеров лития, натрия и калия, полученные из оптимальных аппроксимирующих функций, приведены в табл. 1 и сравниваются с литературными данными. Рассчитанные значения частот колебаний для основных и возбужденных состояний отличаются от имеющихся данных не более чем на 0,1 %. Вращательные постоянные для основных состояний различаются менее чем на 0,2 %, для возбужденных — на 0,004 %. Найденные с помощью потенциальных кривых значения вращательного параметра α_e , центробежных постоянных D_e и H_e , отсутствующие в литературе, сопоставлены со значениями, вычисленными с использованием данных, которые определены по следующим эмпирическим соотношениям:

соотношение Пекериса [20]

$$\alpha_e = \frac{6B_e^2 [(\omega_e x_e / B_e)^{1/2} - 1]}{\omega_e};$$

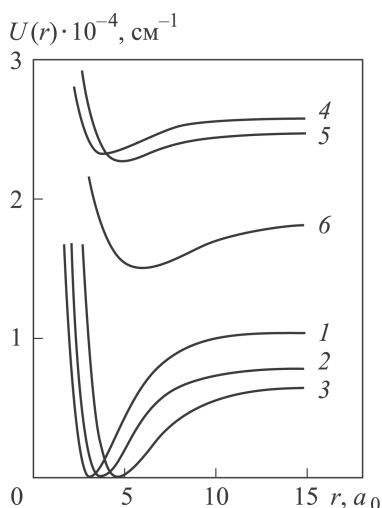


Рис. 1. Потенциальные кривые для основных и возбужденных электронных состояний катионов димеров лития, натрия и калия:

$X^2\Sigma_g^+$ состояние: 1 — Li_2^+ ; 2 — Na_2^+ ; 3 — K_2^+ ; $(1)^2\Pi_u$ состояние: 4 — Li_2^+ ; 5 — Na_2^+ ; 6 — K_2^+

Сравнение результатов расчета молекулярных постоянных, см^{-1} , для основных и возбужденных электронных состояний катионов димеров лития, натрия и калия с данными, взятыми из работ [10–13, 15, 17]

Молекулярные постоянные	Li_2^+		Na_2^+		K_2^+	
	$X^2\Sigma_g^+$	$(1)^2\Pi_u$	$X^2\Sigma_g^+$	$(1)^2\Pi_u$	$X^2\Sigma_g^+$	$(1)^2\Pi_u$
ω_e	262,0 261,969	110,5 110,501	119,940 119,939	50,23 50,224	72,500 72,426	33,450 33,481
$\omega_e x_e$	1,7000 1,6994	1,1900 1,1900	0,7700 0,7699	0,5300 0,5297	0,2000 0,1947	0,0810 0,0811
B_e	0,4960 0,4961	0,310921 0,310932	0,112198 0,112196	0,063533 0,063534	0,0410 0,0409	0,025546 0,025547
α_e	4,796(-4)* 5,203(-4)	5,020(-3)* 5,008(-3)	10,200(-4)* 9,582(-4)	9,104(-4)* 9,133(-4)	1,681(-4)* 1,642(-4)	9,380(-5)* 9,134(-5)
D_e	7,110(-6)** 7,127(-6)	9,847(-6)** 9,836(-6)	3,927(-7)** 3,936(-7)	4,066(-7)** 4,069(-7)	5,245(-8)** 5,216(-8)	5,96(-8)** 5,95(-8)
β_e	5,203(-9)	2,18(-8)	7,908(-10)	1,87(-9)	1,59(-11)	4,629(-11)
H_e	1,098(-10)*** 1,067(-10)	3,261(-10)*** 3,237(-10)	5,136(-13)*** 5,108(-13)	2,751(-13)*** 2,699(-13)	5,310(-14)*** 5,370(-14)	1,695(-13)*** 1,684(-13)
ζ_e	-1,55(-12)	4,22(-12)	6,0(-15)	4,92(-14)	2,89(-16)	7,95(-16)

Пр и м е ч а н и е. В числителе приведены данные для Li_2^+ , взятые из работ [10, 13], для Na_2^+ — из работы [17], для K_2^+ — из работ [12, 15]. В знаменателе указаны значения, вычисленные по радикальному волновому уравнению Шредингера.

* — значения, полученные по эмпирическому соотношению Пекериса с использованием данных, взятых из литературы.

** — значения, найденные по эмпирическому соотношению Кратцера с использованием данных, взятых из литературы.

*** — значения, рассчитанные по эмпирическому соотношению Кэмбла с использованием данных, взятых из литературы.

Числа в скобках обозначают десятичные показатели степени.

соотношение Кратцера [22]

$$D_e = \frac{4B_e^3}{\omega_e^2}; \quad (1)$$

соотношение Кэмбла и др. [23]

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

Максимальные разности значений D_e и H_e для основных состояний, рассчитанные по соотношениям (1) и (2), отличаются от значений, полученных с помощью потенциальных кривых на 0,6 и 3 %, для возбужденных состояний — на 0,2 и 2 %.

Расчет радиационных параметров. К радиационным параметрам относятся коэффициенты Эйнштейна для спонтанного излучения $A_{v'v''}$, силы осциллятора $f_{v'v''}$, факторы Франка – Кондона (ФФК) $q_{v'v''}$, время жизни колебательных уровней возбужденного электронного состояния $\tau_{v'}$, функция дипольного момента электронного перехода межъядерного расстояния $R_e(r)$.

Коэффициент Эйнштейна, s^{-1} , и сила осциллятора для поглощения (безразмерная величина) связаны с функцией $R_e(r)$ (а.е.) соотношениями [24]

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

$$f_{v'v''}^n = 3,0376 \cdot 10^{-6} \frac{\nu_{v'v''} (2 - \delta_{0,\Lambda'+\Lambda''})}{2 - \delta_{0,\Lambda''}} \left[\langle \psi_{v'}(r) | R_e(r) | \psi_{v''}(r) \rangle \right]^2, \quad (4)$$

где $\nu_{v'v''}$ — волновое число электронно-колебательного перехода, см^{-1} ; $\delta_{0,\Lambda}$ — символ Кронекера, $\delta_{0,\Lambda} = 1$ при $\Lambda = 0$, $\delta_{0,\Lambda} = 0$ для других значений Λ ; Λ — проекция орбитального момента количества движения электронов на межъядерную ось ($\Lambda = 0, 1, 2, \dots$ для состояний $\Sigma, \Pi, \Delta, \dots$); $\psi_{v'}(r)$, $\psi_{v''}(r)$ — колебательные волновые функции возбужденного и основного электронных состояний.

Радиационное время жизни возбужденного электронно-колебательного уровня $\tau_{v'}$, с, связано с коэффициентами Эйнштейна соотношением

$$\tau_{v'} = \left(\sum_{v''} A_{v',v''} \right)^{-1}. \quad (5)$$

Факторы Франка – Кондона характеризуют относительное распределение интенсивностей электронно-колебательных полос и предста-

вляют собой квадраты интеграла перекрытия колебательных волновых функций комбинирующих электронных состояний

$$q_{v'v''} = \langle v' | v'' \rangle = \left| \int_0^{\infty} \Psi_{v'}(r) \Psi_{v''}(r) dr \right|^2. \quad (6)$$

Для расчета волновых чисел электронно-колебательных полос использовалось выражение

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

где T'_e — электронная энергия возбужденного состояния; $E'(v)$, $E''(v)$ — колебательные энергии комбинирующих электронных состояний.

Расчет коэффициентов Эйнштейна, сил осциллятора, радиационного времени жизни, ФФК и волновых чисел электронно-колебательных переходов проведен по соотношениям (3)–(7). В расчетах использовались функции $R_e(r)$, полученные квантово-химическими методами [14, 19].

В настоящей работе определены радиационные параметры для перехода $(1)^2\Pi_u - X^2\Sigma_g^+$ катионов димера лития Li_2^+ ($0 \leq v' \leq 25$, $0 \leq v'' \leq 64$), димера натрия Na_2^+ ($0 \leq v' \leq 25$, $0 \leq v'' \leq 74$), димера калия K_2^+ ($0 \leq v' \leq 25$, $0 \leq v'' \leq 88$), а также значения радиационного времени жизни возбужденных состояний. Вследствие громоздкости рассчитанных массивов радиационных параметров приведена только часть полученных результатов. Результаты расчета радиационных параметров для электронно-колебательного перехода $(1)^2\Pi_u - X^2\Sigma_g^+$ катиона димера натрия представлены в табл. 2, результаты расчета значений радиационного времени жизни для колебательных уровней $0 \leq v \leq 25$ возбужденного электронного состояния $(1)^2\Pi_u$ катионов димеров лития, натрия и калия — на рис. 2.

Обсуждение результатов и заключение. Адекватность построенных потенциальных кривых для основных и возбужденных электронных состояний молекулярных ионов Li_2^+ , Na_2^+ , K_2^+ подтверждена хорошо согласующимися молекулярными постоянными, рассчитанными на их основе, и данными, приведенными в литературе (см. табл. 1). В литературе отсутствуют экспериментальные данные о радиационном времени жизни рассмотренных катионов. Согласно кривым, приведенным на рис. 2, при возрастании колебательного квантового числа время жизни у всех катионов увеличивается. Однако влияние колебательного квантового числа на время жизни различно. При возрастании колебательного квантового числа v от 0 до 25 время $\tau_{v'}(\text{Li}_2^+)$ увеличивается на 5,6 нс, $\tau_{v'}(\text{Na}_2^+)$ на 2 нс, $\tau_{v'}(\text{K}_2^+)$ на 0,8 нс. Слабое влияние колебательного квантового числа на время жизни K_2^+ можно объяснить тем, что катион димера калия более тяжелый по сравнению с

Результаты расчета радиационных параметров для электронно-колебательных полос
($1^2\Pi_u - X^2\Sigma_g^+$ перехода катионов натрия Na_2^+)

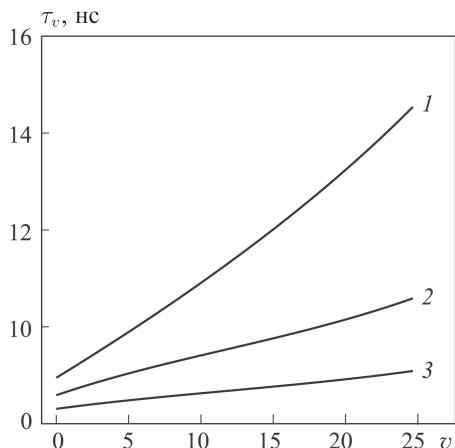
v'	v''									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
0	0	0	0	0,0001	0,0002	0,0008	0,0023	0,0055	0,0115	0,0214
0	0	0	0	8,66(+3)	3,40(+4)	1,09(+5)	3,00(+5)	7,09(+5)	1,47(+6)	2,69(+6)
0	0	0	0	5,20(-5)	2,06(-4)	6,74(-4)	1,86(-3)	4,44(-3)	9,28(-3)	1,72(-2)
22808,7	22 691,7	22575,3	22458,0	22340,8	22223,9	22107,6	21992,0	21877,5	21764,0	21651,8
1	0	0	0,0001	0,0006	0,0020	0,0050	0,0127	0,0251	0,0422	0,0608
0	0	0	1,79(+4)	7,76(+4)	2,64(+5)	7,31(+5)	1,68(+6)	3,26(+6)	5,42(+6)	7,70(+6)
0	0	0	1,06(-4)	4,64(-4)	1,60(-3)	4,46(-3)	1,04(-2)	2,04(-2)	3,41(-2)	4,90(-2)
22858,3	22741,3	22624,9	22507,6	22390,4	22273,5	22157,2	22041,6	21927,1	21813,6	21701,4
2	0	0,0001	0,0007	0,0025	0,0075	0,0177	0,0338	0,0527	0,0670	0,0679
0	0	1,80(+4)	9,28(+4)	3,50(+5)	1,02(+6)	2,38(+6)	4,49(+6)	6,91(+6)	8,66(+6)	8,66(+6)
0	0	1,05(-4)	5,47(-4)	2,08(-3)	6,15(-3)	1,45(-2)	2,76(-2)	4,29(-2)	5,43(-2)	5,49(-2)
22907,3	22790,2	22673,9	22556,6	22439,3	22322,5	22206,1	22090,6	21976,0	21862,6	21750,3
3	0	0,0005	0,0023	0,0076	0,0190	0,0368	0,0554	0,0643	0,0546	0,0296
0	0	7,15(+4)	3,24(+5)	1,05(+6)	2,60(+6)	4,98(+6)	7,41(+6)	8,48(+6)	7,10(+6)	3,80(+6)
0	0	4,15(-4)	1,90(-3)	6,25(-3)	1,56(-2)	3,01(-2)	4,53(-2)	5,24(-2)	4,44(-2)	2,40(-2)
22955,6	22838,5	22722,2	22604,9	22487,6	22370,8	22254,4	22138,9	22024,3	21910,9	21798,6
4	0,0002	0,0015	0,0060	0,0170	0,0352	0,0540	0,0604	0,0454	0,0179	0,0005
0	3,56(+4)	2,16(+5)	8,54(+5)	2,37(+6)	4,85(+6)	7,36(+6)	8,12(+6)	6,03(+6)	2,34(+6)	6,58(+4)
0	2,04(-4)	1,25(-3)	4,99(-3)	1,40(-2)	2,89(-2)	4,44(-2)	4,94(-2)	3,71(-2)	1,45(-2)	4,14(-4)
23003,2	22886,2	22769,8	22652,5	22535,3	22418,4	22302,1	22186,5	22071,9	21958,5	21846,3
5	0,0007	0,0037	0,0127	0,0300	0,0500	0,0578	0,0422	0,0139	0	0,0136
0	9,92(+4)	5,30(+5)	1,81(+6)	4,21(+6)	6,94(+6)	7,92(+6)	5,71(+6)	1,85(+6)	0	1,77(+6)
0	5,66(-4)	3,05(-3)	1,05(-2)	2,47(-2)	4,12(-2)	4,75(-2)	3,46(-2)	1,13(-2)	0	1,10(-2)
23050,2	22933,2	22816,8	22699,5	22582,3	22465,4	22349,1	22233,5	22118,9	22005,5	21893,3

Результаты расчета радиационных параметров для электронно-колебательных полос
(1)²Π_u – X²Σ_g⁺ перехода катионов натрия Na₂⁺

v'	v''										
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
6	0,0002 2,44(+4) 1,37(-4) 23096,6	0,0016 2,34(+5) 1,33(-3) 22979,6	0,0076 1,10(+6) 6,29(-3) 22863,2	0,0223 4,80(+6) 2,77(-2) 22791,6	0,0519 7,36(+6) 3,58(-2) 22628,6	0,0558 7,78(+6) 4,60(-2) 22511,8	0,0439 6,04(+6) 3,61(-2) 22395,4	0,0150 2,05(+6) 1,24(-2) 22279,9	0 0 0 22165,3	0,0146 1,92(+6) 1,19(-2) 22051,9	0,0345 4,49(+6) 2,80(-2) 21939,7
7	0,0004 5,69(+4) 3,18(-4) 23142,4	0,0033 4,84(+5) 2,74(-3) 23025,3	0,0136 1,97(+6) 1,12(-2) 22908	0,0335 4,80(+6) 2,77(-2) 22791,6	0,0519 7,36(+6) 4,29(-2) 22674,4	0,0483 6,77(+6) 3,99(-2) 22557,5	0,0208 2,87(+6) 1,71(-2) 22441,2	0,0004 4,80(+4) 2,89(-4) 22325,7	0,0118 1,58(+6) 9,61(-3) 22211,1	0,0326 4,34(+6) 2,66(-2) 22097,6	0,0268 3,52(+6) 2,18(-2) 21985,4
8	0,0008 1,19(+5) 6,64(-4) 23187,6	0,0061 8,92(+5) 5,03(-3) 23070,4	0,0214 3,12(+6) 1,77(-2) 22954,4	0,0436 6,28(+6) 3,61(-2) 22836,8	0,0518 7,38(+6) 4,28(-2) 22719,5	0,03072 4,32(+6) 2,54(-2) 22602,7	0,0033 4,59(+5) 2,72(-3) 22486,3	0,0064 8,71(+5) 5,22(-3) 22370,8	0,0290 3,93(+6) 2,38(-2) 22256,2	0,0280 3,74(+6) 2,29(-2) 22142,8	0,0530 7,03(+5) 4,34(-3) 22030,6
9	0,00157 2,27(+5) 1,26(-3) 23232,0	0,0101 1,49(+6) 8,37(-3) 23114,9	0,0303 4,43(+6) 2,51(-2) 22998,6	0,0498 7,20(+6) 4,12(-2) 22881,3	0,0424 6,06(+6) 3,51(-2) 22764,0	0,0119 1,68(+6) 9,88(-3) 22647,2	0,0011 1,49(+5) 8,78(-4) 22530,8	0,0222 3,06(+6) 1,83(-2) 22415,3	0,0305 4,15(+6) 2,50(-2) 22300,7	0,0090 1,21(+6) 7,39(-3) 22187,3	0,0162 2,15(+6) 1,32(-2) 22075,1
10	0,0027 4,00(+5) 2,21(-3) 23275,9	0,0154 2,28(+6) 1,28(-2) 23158,8	0,03883 5,70(+6) 3,22(-2) 23042,5	0,0497 7,22(+6) 4,12(-2) 22925,2	0,0270 3,89(+6) 2,24(-2) 22807,9	0,0010 1,50(+5) 8,72(-4) 22691,1	0,0118 1,65(+6) 9,72(-3) 22574,7	0,0308 4,27(+6) 2,54(-2) 22459,2	0,01609 2,20(+6) 1,32(-2) 22344,6	0 0 0 22231,2	0,0162 2,15(+6) 1,32(-2) 22118,9

П р и м е ч а н и е. В первой строке каждого столбца дано значение $q_{v',v''}$; во второй — $A_{v',v''}$, s^{-1} ; в третьей — $f_{v',v''}^{\text{II}}$ (безразмерная величина); в четвертой — $\nu_{v',v''}$, см^{-1} . Для $q_{v',v''} < 10^{-4}$ приведены значения $q_{v',v''}$, $A_{v',v''}$, $f_{v',v''}^{\text{II}}$ равные нулю.

Рис. 2. Результаты расчета значений радиационного времени жизни для колебательных уровней возбужденного электронного состояния $(1)^2\Pi_u$ катионов димеров лития (1), натрия (2) и калия (3)



катионами лития и натрия. Молекулярные постоянные катиона калия K_2^+ имеют более низкие значения, чем у катионов Li_2^+ и Na_2^+ (см. табл. 1). Поэтому влияние колебательных квантовых чисел на время жизни катионов калия K_2^+ должно быть слабее, чем у катионов Li_2^+ и Na_2^+ . В работе [9] были рассчитаны значения времени жизни для гетероядерных димеров щелочных металлов NaK, NaRb и NaCs. Влияние колебательного квантового числа на время жизни более тяжелого димера NaCs самое слабое, по сравнению с димерами NaK и NaRb.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Ultracold triplet molecules in the rovibrational ground state* / F. Lang, K. Winkler, C. Strauss, R. Grimm, J.K. Denschlag // *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. *Coherent transfer of photoassociated molecules into the rovibrational ground state* / K. Aikawa, D. Akamatsu, M. Hayashi, K. Oasa, J. Kobayashi, P. Naidon, T. Kishimoto, M. Ueda, S. Inouye // *Phys. Rev. Lett.* 2010. Vol. 105. P. 203001–203005.
4. 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.
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 спектроскоп.* 2010. Т. 109. № 5. С. 739–745.
6. 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.
7. 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 (49). С. 67–85.
8. 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> (дата обращения: 10.11.2014).

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 спектроскоп. 2014. Т. 117. № 3. С. 373–380.
10. *Bernheim R.A., Gold L.P., Tipton T.* Rydberg states of $^7\text{Li}_2$ by pulsed optical-optical double resonance spectroscopy // J. Chem. Phys. 1983. Vol. 78. P. 3635–3647.
11. *Autoionizing rydberg states of the Na₂ molecule / S. Martin, J. Chevaliere, S. Valignat, J.P. Perrot, M. Broyer* // Chem. Phys. Lett. 1982. Vol. 87. P. 235–239.
12. *Leutwyler S., Herrmann A., Woste L., Schumacher E.* Isotope selective two-step photoionization study of K₂ in a supersonic molecular beam // Chem. Phys. 1983. Vol. 48. P. 253–267.
13. *Bouzouita H., Ghanmi C., Berriche H.* Ab initio study of the alkali-dimer cation Li₂⁺ // J. Molecul. Structure. 2006. Vol. 777. P. 75–80.
14. *Kirby-Docken K., Cerjan C.J., Dalgarno A.* Oscillator strengths and photodissociation cross sections for Li₂⁺ and Na₂⁺ // Chem. Phys. Lett. 1976. Vol. 40. P. 205–209.
15. *Llyabaev E., Kaldor U.* Ground and excited states of K₂ and K₂⁺ by the open-shell coupled cluster method // J. Chem. Phys. 1993. Vol. 98. P. 7126–7131.
16. *Jasik P., Wilczynski J., Sienkiewicz J.E.* Calculatoin of adiabatic potentials of Li₂⁺ // Eur. Phys J. Special Topics. 2007. Vol. 144. P. 85–91.
17. *Berriche H.* Potential energy and dipole moment of the Na₂⁺ ionic molecule // Int. J. Quant. Chemistry. 2013. Vol. 113. P. 2405–2412.
18. *Magnier S., Aubert-Frecon M.* Theoretical determination of the K₂⁺ electronic structure // J. Quant. Spectr. Radiat. Transfer. 2003. Vol. 78. P. 217–225.
19. *Jrajij A., Alouche A.R., Magnier S., Aubert-Frecon M.* Theoretical spin-orbit structure on the alkali dimer cation K₂⁺ // Can. J. Phys. 2008. Vol. 86. P. 1409–1415.
20. *Герцберг Г.* Спектры и строение двухатомных молекул; пер. с англ. М.: ИЛ, 1949. 403 с.
21. *Цюликe 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. P. 289–296.
23. *Molecular Spectra in Gases / E.C. Kemble, R.T. Birge, W.F. Colby 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 $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ band 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] Aikawa K., Akamatsu D., Hayashi M., Oasa K., Kobayashi J., Naidon P., Kishimoto T., Ueda M., Inouye S. Coherent transfer of photoassociated molecules into the rovibrational ground state. *Phys. Rev. Lett.*, 2010, vol. 105, pp. 203001–203005.
- [4] 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.).
- [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. Spektrosk.* [Opt. Spectrosc.], 2010, vol. 109, no. 5, pp. 739–745 (in Russ.).

- [6] 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. Spektrosk.* [Opt. Spectrosc.], 2012, vol. 113, no. 4, pp. 387–394 (in Russ.).
- [7] 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.).
- [8] 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. *Jelekt. naučno-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> (accessed 10.11.2014).
- [9] Smirnov A.D. Calculation of Spectroscopic Constants and Radiative Parameters for $B^1\Pi-X^1\Sigma^+$ Electronic Transition of the Molecules NaK, NaRb, NaCs. *Opt. Spektrosk.* [Opt. Spectrosc.], 2014, vol. 117, no. 3, pp. 373–380 (in Russ.).
- [10] Bernheim R.A., Gold L.P., Tipton T. Rydberg states of $^7\text{Li}_2$ by pulsed optical-optical double resonance spectroscopy. *J. Chem. Phys.*, 1983, vol. 78, pp. 3635–3647.
- [11] Martin S., Chevaliere J., Valignat S., Perrot J.P., Broyer M. Autoionizing rydberg states of the Na_2 molecule. *Chem. Phys. Lett.*, 1982, vol. 87, pp. 235–239.
- [12] Leutwyler S., Herrmann A., Woste L., Schumacher E. Isotope selective two-step photoionization study of K_2 in a supersonic molecular beam. *Chem. Phys.*, 1983, vol. 48, pp. 253–267.
- [13] Bouzouita H., Ghanmi C., Berriche H. Ab initio study of the alkali-dimer cation Li_2^+ . *J. Molecul. Structure*, 2006, vol. 777, pp. 75–80.
- [14] Kirby-Docken K., Cerjan C.J., Dalgarno A. Oscillator strengths and photodissociation cross sections for Li_2^+ and Na_2^+ . *Chem. Phys. Lett.*, 1976, vol. 40, pp. 205–209.
- [15] Llyabaev E., Kaldor U. Ground and excited states of K_2 and K_2^+ by the open-shell coupled cluster method. *J. Chem. Phys.*, 1993, vol. 98, pp. 7126–7131.
- [16] Jasik P., Wilczynski J., Sienkiewicz J.E. Calculatoin of adiabatic potentials of Li_2^+ . *Eur. Phys J. Special Topics*, 2007, vol. 144, pp. 85–91.
- [17] Berriche H. Potential energy and dipole moment of the Na_2^+ ionic molecule. *Int. J. Quant. Chemistry*, 2013, vol. 113, pp. 2405–2412.
- [18] Magnier S., Aubert-Frecon M. Theoretical determination of the K_2^+ electronic structure. *J. Quant. Spectr. Radiat. Transfer*, 2003, vol. 78, pp. 217–225.
- [19] Jraij A., Alouche A. R., Magnier S., Aubert-Frecon M. Theoretical spin-orbit structure on the alkali dimer cation K_2^+ . *Can. J. Phys.*, 2008, vol. 86, pp. 1409–1415.
- [20] Herzberg G. *Molecular Spectra and Molecular Structure: Spectra of Diatomic Molecules*. Princeton; D. Van Nostrand Co., 1950.
- [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, pp. 289–296.
- [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 $A^1\Sigma_u^+-X^1\Sigma_g^+$ band system of $^{107,109}\text{Ag}_2$. *J. Mol. Spectr.*, 2008, vol. 248, pp. 111–121.

Статья поступила в редакцию 09.02.2015

Смирнов Александр Давыдович — канд. хим. наук, доцент кафедры “Химия” МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор 64 научных работ в области квантовой химии и молекулярной спектроскопии.

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

Smirnov A.D. — Ph.D. (Chem.), Associate Professor of Chemistry, Department of Chemistry, Bauman Moscow State Technical University, author of 64 research publications in the fields of quantum chemistry and molecular spectroscopy.

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 катионов димеров лития, натрия и калия // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2015. № 4. С. 45–56.

Please cite this article in English as:

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.