

## РАСЧЕТ РАДИАЦИОННЫХ ПАРАМЕТРОВ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ИОНОВ CsLi<sup>+</sup> И LiK<sup>+</sup>

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, волновых чисел электронно-колебательных переходов в системах полос  $(2)^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$ ) молекулярных ионов CsLi<sup>+</sup> ( $0 \leq v' \leq 15$ ,  $0 \leq v'' \leq 51$ ), LiK<sup>+</sup> ( $0 \leq v' \leq 15$ ,  $0 \leq v'' \leq 46$ ) и радиационных времен 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. Рассчитанные радиационные параметры и времена жизни получены впервые

### Ключевые слова

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

Поступила в редакцию 15.12.2016  
© 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 с использованием 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 временах жизни.

Радиационные параметры и времена жизни для гомоядерных димеров и катионов димеров щелочных металлов (Li<sub>2</sub>, Na<sub>2</sub>, K<sub>2</sub>, Rb<sub>2</sub>, Cs<sub>2</sub>, Li<sub>2</sub><sup>+</sup>, Na<sub>2</sub><sup>+</sup>, K<sub>2</sub><sup>+</sup>) были рассчитаны в работах [4–9]. Радиационные параметры и времена жизни для гетероядерных димеров (NaK, NaRb, NaCs, KRb, NaLi, CsLi, RbCs) были вычислены в работах [10–13]. Расчеты проведены квантово-химическим методом на основе потенциальных кривых. Сравнение результатов расчета с экспериментальными данными показало эффективность метода расчета. В настоящей работе выполнены расчеты радиационных параметров для электронного перехода  $(2)^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$  молекулярных ионов CsLi<sup>+</sup> и LiK<sup>+</sup>. Экспериментальные изучения молекулярных ионов не проводились. Теоретические исследования с использованием метода *ab initio* были выполнены в работах [14, 15], в которых

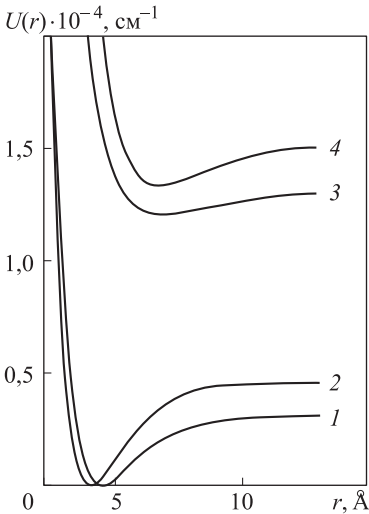
рассчитаны молекулярные постоянные для основных и возбужденных электронных состояний  $\text{CsLi}^+$  и  $\text{LiK}^+$ .

**Построение потенциальных кривых.** Для аппроксимации потенциальных кривых основных и возбужденных электронных состояний  $\text{CsLi}^+$  и  $\text{LiK}^+$  использована пятипараметрическая потенциальная функция Гульберга — Гиршфельдера [16]:

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

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

Для построения потенциальных кривых основных и возбужденных электронных состояний  $\text{CsLi}^+$  и  $\text{LiK}^+$  использованы колебательные и вращательные молекулярные постоянные [14, 15].



**Рис. 1.** Потенциальные кривые для основных и возбужденных электронных состояний молекулярных ионов  $\text{CsLi}^+$  и  $\text{LiK}^+$ :

1, 2 —  $\text{CsLi}^+$ ,  $\text{LiK}^+$  для основного состояния  $X^2\Sigma^+$ ; 3, 4 —  $\text{CsLi}^+$ ,  $\text{LiK}^+$  для возбужденного состояния  $(2)^2\Sigma^+$

Потенциальные кривые для основных и возбужденных состояний молекулярных ионов, 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 литературными данными. Колебательные энергии найдены в результате численного решения радиального волнового уравнения. Колебательные энергии рассчитаны до высоких значений колебательных квантовых чисел. Для основных электронных состояний:  $\nu_{\max}(\text{LiK}^+) = 46$ ;  $\nu_{\max}(\text{CsLi}^+) = 51$ . Для возбужденных электронных состояний колебательные энергии определены для  $\nu_{\max} = 15$ . Расчет вращательных и центробежных постоянных проведен по теории возмущений для модели вращающегося осциллятора двухатомной молекулы [17].

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

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

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

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

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

Полученные из оптимальных аппроксимирующих функций молекулярные постоянные для основных и возбужденных электронных состояний CsLi<sup>+</sup> и LiK<sup>+</sup> приведены в табл. 1 и сравниваются с литературными данными. Колебательные постоянные ( $\omega_e$ ,  $\omega_e x_e$ ), рассчитанные в настоящей работе для основных и возбужденных состояний, совпадают с литературными данными. Вращательные постоянные ( $B_e$ ) для основных и возбужденных состояний различаются менее чем на 0,005 %. Полученные вращательные молекулярные постоянные  $\alpha_e$  и центробежные молекулярные постоянные  $D_e$ ,  $H_e$  сопоставлены со значениями, рассчитанными с использованием литературных данных по эмпирическим соотношениям:

– соотношению Пекериса [16]

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

– соотношению Кратцера [18]

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

– соотношению Кэмбла [19]:

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

и другим соотношениям.

Таблица 1

**Сравнение рассчитанных молекулярных постоянных для основных и возбужденных электронных состояний молекулярных ионов CsLi<sup>+</sup> и LiK<sup>+</sup> с литературными данными**

Молекулярные постоянные	CsLi <sup>+</sup>		KLi <sup>+</sup>	
	X <sup>2</sup> Σ <sup>+</sup>	(2) <sup>2</sup> Σ <sup>+</sup>	X <sup>2</sup> Σ <sup>+</sup>	(2) <sup>2</sup> Σ <sup>+</sup>
ω <sub>e</sub>	124,46	68,69	152,12	62,17
	124,46	68,69	152,12	62,17
ω <sub>e</sub> x <sub>e</sub>	1,08	0,63	1,45	0,56
	1,08	0,63	1,45	0,56
B <sub>e</sub>	0,138337	0,059126	0,189566	0,062448
	0,138336	0,059123	0,189571	0,062446
α <sub>e</sub>	1,655(-3)*	6,914(-4)*	2,501(-3)*	7,507(-4)*
	1,663(-3)	6,854(-4)	2,484(-3)	7,452(-4)

Молекулярные постоянные	CsLi <sup>+</sup>		KLi <sup>+</sup>	
	$\chi^2 \Sigma^+$	$(2)^2 \Sigma^+$	$\chi^2 \Sigma^+$	$(2)^2 \Sigma^+$
$D_e$	6,836(-7)**	1,752(-7)**	1,176(-6)**	2,520(-7)**
	6,847(-7)	1,757(-7)	1,178(-6)	2,519(-7)
$H_e$	6,96(-13)***	1,37(-13)***	1,71(-12)***	5,52(-15)***
	6,69(-13)	1,38(-13)	1,67(-12)	5,44(-15)

*Примечания.* В первой строке приведены данные, взятые из работ [14, 15], во второй строке — значения, рассчитанные на основе потенциальных кривых. \* — расчет по соотношению (1) с использованием литературных данных; \*\* — расчет по соотношению (2) с использованием литературных данных; \*\*\* — расчет по соотношению (3) с использованием литературных данных. В скобках приведен десятичный порядок величины.

**Расчет радиационных параметров.** К радиационным параметрам относятся коэффициенты Эйнштейна для спонтанного излучения  $A_{v'v''}$ , силы осциллятора  $f_{v'v''}$ , факторы Франка — Кондона  $q_{v'v''}$ , волновые числа электронно-колебательных полос  $\nu_{v'v''}$ , времена жизни колебательных уровней возбужденного электронного состояния  $\tau_{v'}$ , функция дипольного момента электронного перехода от межъядерного расстояния  $R_e(r)$ .

Коэффициент Эйнштейна,  $s^{-1}$ , и сила осциллятора для поглощения (безразмерная величина) связаны с функцией  $R_e(r)$ , ат. ед., соотношениями [20]

$$A_{v'v''} = 2,026 \cdot 10^{-6} \cdot \frac{\nu_{v'v''}^3 (2 - \delta_{0,\Lambda'+\Lambda''})}{(2 - \delta_{0,\Lambda''})} [\langle \psi_{v'}(r) | R_e(r) | \psi_{v''}(r) \rangle]^2; \quad (4)$$

$$f_{v'v''}^{полг} = 3,0376 \cdot 10^{-6} \cdot \frac{\nu_{v'v''} (2 - \delta_{0,\Lambda'+\Lambda''})}{(2 - \delta_{0,\Lambda''})} [\langle \psi_{v'}(r) | R_e(r) | \psi_{v''}(r) \rangle]^2, \quad (5)$$

где  $\Lambda$  — проекция орбитального момента количества движения электронов на межъядерную ось ( $\Lambda = 0, 1, 2, \dots$  для состояний  $\Sigma, \Pi, \Delta, \dots$ );  $\delta_{0,\Lambda}$  — символ Кронекера,  $\delta_{0,\Lambda} = 1$ , если  $\Lambda = 0$ ,  $\delta_{0,\Lambda} = 0$  для других значений  $\Lambda$ ;  $\psi_{v'}(r)$ ,  $\psi_{v''}(r)$  — колебательные волновые функции возбужденного и основного электронных состояний.

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

$$\tau_{v'} = \left( \sum_{v''} A_{v'v''} \right)^{-1}. \quad (6)$$

Факторы Франка — Кондона характеризуют относительное распределение интенсивностей электронно-колебательных полос и представляют собой квадраты интеграла перекрытия колебательных волновых функций комбинирующих электронных состояний

$$q_{v'v''} = \langle v' | v'' \rangle = \left| \int_0^\infty \Psi_{v'}(r) \Psi_{v''}(r) dr \right|^2. \quad (7)$$

Для расчета волновых чисел электронно-колебательных полос использовано выражение

$$\nu_{v'v''} = T'_e + E(v) - E''(v), \quad (8)$$

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

Расчет коэффициентов Эйнштейна, сил осциллятора, радиационных времен жизни, факторов Франка — Кондона и волновых чисел электронно-колебательных переходов молекулярных ионов выполнен по соотношениям (4)–(8). В расчетах использованы функции  $R_e(r)$ , полученные квантово-химическими методами [14, 15]. В настоящей работе были вычислены радиационные параметры для электронного перехода  $(2)^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$  молекулярных ионов CsLi<sup>+</sup> ( $0 \leq v' \leq 15$ ,  $0 \leq v'' \leq 51$ ) и LiK<sup>+</sup> ( $0 \leq v' \leq 15$ ,  $0 \leq v'' \leq 46$ ), а также радиационные времена жизни возбужденных состояний. Вследствие громоздкости рассчитанных массивов радиационных параметров приведена только часть полученных результатов. Результаты расчета радиационных параметров ( $A_{v'v''}$ ,  $f_{v'v''}^{\text{полг}}$ ,  $\nu_{v'v''}$ ) для электронно-колебательных полос  $(2)^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$  перехода CsLi<sup>+</sup> и LiK<sup>+</sup> приведены в табл. 2 и 3. Результаты расчета радиационных времен жизни для колебательных уровней  $0 \leq v' \leq 15$  возбужденного электронного состояния  $(2)^2\Sigma^+$  молекулярных ионов CsLi<sup>+</sup> и LiK<sup>+</sup> показаны на рис. 2.

Таблица 2

**Результаты расчета радиационных параметров для электронно-колебательных полос  $(2)^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$  электронного перехода молекулярного иона CsLi<sup>+</sup>**

$v'$	$v''$							
	15	16	17	18	19	20	21	22
0	5,81(+4)	1,76(+5)	4,45(+5)	9,40(+5)	1,64(+6)	2,36(+6)	2,73(+6)	2,50(+6)
	6,38(-4)	1,95(-3)	5,02(-3)	1,08(-2)	1,91(-2)	2,78(-2)	3,26(-2)	3,03(-2)
	11704,8	11614,7	11526,8	11441,0	11357,4	11275,9	11196,7	11119,6
1	2,56(+5)	5,99(+5)	1,11(+6)	1,54(+6)	1,48(+6)	7,92(+5)	6,89(+4)	2,70(+5)
	2,76(-3)	6,58(-3)	1,23(-2)	1,74(-2)	1,70(-2)	9,23(-3)	8,14(-4)	3,23(-3)
	11772,2	11682,1	11594,2	11508,4	11424,8	11343,4	11264,1	11187,0
2	5,78(+5)	1,02(+6)	1,29(+6)	9,96(+5)	2,84(+5)	2,87(+4)	6,87(+5)	1,18(+6)
	6,18(-3)	1,11(-2)	1,42(-2)	1,11(-2)	3,22(-3)	3,30(-4)	8,03(-3)	1,40(-2)
	11838,4	11748,3	11660,4	11574,6	11491,0	11409,6	11330,3	11253,2
3	8,83(+5)	1,12(+6)	8,40(+5)	1,57(+5)	5,79(+4)	6,65(+5)	8,17(+5)	1,33(+5)
	9,35(-3)	1,21(-2)	9,16(-3)	2,18(-3)	6,50(-4)	7,57(-3)	9,44(-3)	1,56(-3)
	11903,3	11813,2	11725,3	11639,5	11555,9	11474,5	11395,2	11318,1

$v'$	$v''$							
	15	16	17	18	19	20	21	22
4	1,00(+6)	8,35(+5)	2,49(+5)	2,35(+4)	5,29(+5)	6,89(+5)	9,66(+4)	2,39(+5)
	1,05(-2)	8,88(-3)	2,68(-3)	2,57(-4)	5,87(-3)	7,76(-3)	1,10(-3)	2,76(-3)
	11966,9	11876,8	11788,2	11703,2	11619,6	11538,1	11458,8	11381,7
5	8,71(+5)	3,85(+5)	6,16(+2)	3,44(+5)	6,51(+5)	1,65(+5)	1,25(+5)	6,40(+5)
	9,02(-3)	4,05(-3)	6,59(-6)	3,73(-3)	7,16(-3)	1,84(-3)	1,42(-3)	7,34(-3)
	12029,3	11939,2	11851,3	11765,6	11681,9	11600,5	11521,2	11444,1

*Примечание.* В первой строке приведены значения  $A_{v'v''}$ ,  $c^{-1}$ , во второй — значения  $f_{v'v''}^{\text{погл}}$  (безразмерная величина), в третьей — значения  $\nu_{v'v''}$ ,  $cm^{-1}$ .

Таблица 3

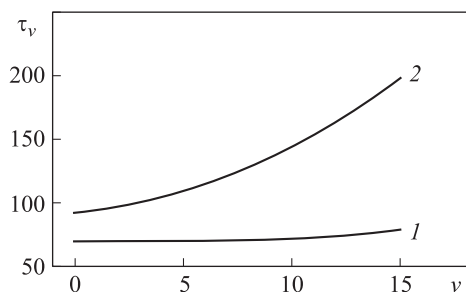
**Результаты расчета радиационных параметров для электронно-колебательных полос  $(2)^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$  электронного перехода молекулярного иона  $LiK^+$**

$v'$	$v''$							
	23	24	25	26	27	28	29	30
0	3,60(+5)	7,95(+5)	1,42(+6)	2,03(+6)	2,28(+6)	1,94(+6)	1,17(+6)	4,64(+5)
	6,18(-3)	1,39(-2)	2,52(-2)	3,67(-2)	4,19(-2)	3,61(-2)	2,22(-2)	8,94(-3)
	9348,6	9265,6	9185,5	9108,3	9033,9	8962,6	8894,1	8828,5
1	8,35(+5)	1,18(+6)	1,09(+6)	4,73(+5)	2,57(+3)	4,78(+5)	1,59(+6)	2,00(+6)
	1,41(-2)	2,04(-2)	1,91(-2)	8,43(-3)	4,67(-5)	8,80(-3)	2,98(-2)	3,81(-2)
	9409,6	9326,6	9246,5	9169,3	9095,0	9023,6	8955,1	8889,5
2	1,01(+6)	7,76(+5)	1,72(+5)	7,48(+4)	6,99(+5)	8,00(+5)	1,02(+5)	3,89(+5)
	1,68(-2)	1,62(-2)	2,97(-3)	1,32(-3)	1,25(-2)	1,45(-2)	1,88(-3)	7,29(-3)
	9469,6	9386,6	9306,5	9229,3	9154,9	9083,6	9015,1	8949,5
3	6,55(+5)	1,52(+5)	6,97(+4)	6,08(+5)	5,30(+5)	3,24(+3)	4,92(+5)	6,89(+5)
	1,08(-2)	2,56(-3)	1,19(-3)	1,06(-2)	9,35(-3)	5,81(-5)	8,95(-3)	1,26(-2)
	9528,4	9445,4	9365,3	9288,1	9213,8	9142,4	9073,9	9008,3
4	1,95(+5)	1,41(+4)	4,14(+5)	4,87(+5)	1,40(+4)	3,76(+5)	4,81(+5)	2,93(+3)
	3,18(-3)	2,34(-4)	6,99(-3)	8,35(-3)	2,45(-4)	6,65(-3)	8,69(-3)	5,34(-5)
	9586,1	9503,1	9422,9	8345,8	9271,5	9200,1	9191,6	9065,9
5	1,48(+3)	2,14(+5)	4,12(+5)	7,70(+4)	1,71(+5)	4,58(+5)	9,30(+3)	4,22(+5)
	2,38(-5)	3,50(-3)	7,12(-3)	1,30(-3)	2,94(-3)	8,00(-3)	1,65(-4)	7,60(-3)
	9642,6	9559,6	9479,5	9402,3	9328,0	9258,6	9188,1	9122,5

**Выводы.** Рассчитаны радиационные параметры (коэффициенты Эйнштейна для спонтанного излучения, силы осциллятора для поглощения, факторы Франка — Кондона, волновые числа электронно-колебательных полос для  $(2)^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$  электронного перехода) и радиационные времена жизни возбужденных электронных состояний для молекулярных ионов  $CsLi^+$  и  $LiK^+$ .

Адекватность построенных потенциальных кривых для основных и возбужденных электронных состояний, на основе которых были вычислены радиацион-

**Рис. 2.** Результаты расчета радиационных времен жизни для колебательных уровней возбужденного электронного состояния молекулярных ионов CsLi<sup>+</sup> (1) и LiK<sup>+</sup> (2)



ные параметры молекулярных ионов CsLi<sup>+</sup>, LiK<sup>+</sup>, была подтверждена хорошо согласующимися молекулярными постоянными, определенными на их основе и литературными данными (см. табл. 1). Рассчитанные времена жизни возбужденных электронных состояний принадлежат наносекундному диапазону и плавно увеличиваются при изменении колебательных уровней энергии в интервале изменения колебательных квантовых чисел  $0 \leq \nu' \leq 15$ . Однако влияние колебательных энергий на времена жизни молекулярных ионов различно.

Время жизни ионов LiK<sup>+</sup> увеличивается на 102 нс, а ионов CsLi<sup>+</sup> — на 9 нс. Слабое влияние колебательного квантового числа на время жизни иона CsLi<sup>+</sup> можно объяснить тем, что этот молекулярный ион более тяжелый, чем ион LiK<sup>+</sup>. Молекулярные постоянные иона CsLi<sup>+</sup> имеют более низкие значения, чем у ионов LiK<sup>+</sup> (см. табл. 1), поэтому влияние колебательных квантовых чисел на время жизни иона CsLi<sup>+</sup> должно быть слабее, чем у иона LiK<sup>+</sup>. Влияние колебательного квантового числа на время жизни у более тяжелого иона K<sub>2</sub><sup>+</sup> самое слабое по сравнению с ионами Li<sub>2</sub><sup>+</sup> и Na<sub>2</sub><sup>+</sup> [9]. Полученные радиационные параметры могут быть использованы для диагностики плазмы, состоящей из атомов и ионов щелочных металлов, для пополнения банка данных по радиационным параметрам для двухатомных молекул и молекулярных ионов [21].

## 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. Iss. 13. P. 133005–133009. DOI: 10.1103/PhysRevLett.101.133005
2. *Dark resonances for ground state transfer of molecular quantum gases* / M.J. Mark, J.G. Danzl, E. Haller, M. Gustavsson, et al. // Appl. Phys. B. 2009. Vol. 95. Iss. 2. P. 219–225. DOI: 10.1007/s00340-009-3407-1
3. *Aikawa K., Akamatsu D., Hayashi M., Oasa K., et al. Coherent transfer of photoassociated molecules in to the rovibrational ground state* // Phys Rev. Lett. 2010. Vol. 105. Iss. 20. P. 203001–203005. DOI: 10.1103/PhysRevLett.105.203001
4. *Смирнов А.Д. Расчет радиационных параметров  $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$  перехода димера цезия* // Журнал прикладной 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 спектроскопия. 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 спектроскопия. 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. С. 67–85.
8. Смирнов А.Д. Энергетические и радиационные свойства электронного перехода 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>
9. 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
10. Смирнов А.Д. Расчет спектроскопических постоянных и радиационных параметров для электронного перехода  $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  молекул NaK, NaRb, NaCs // Оптика и спектроскопия. 2014. Т. 117. № 3. С. 373–380. DOI: 10.7868/S0030403414080248
11. Смирнов А.Д. Расчет радиационных параметров электронного перехода  $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  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
12. Федоров В.В., Смирнов А.Д. Расчет радиационных параметров для электронного перехода  $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma^+$  молекулы NaLi // Современные тенденции развития науки и технологий. Сборник научных трудов по материалам VI Международной научно-практической конференции. Ч. 6-3. 2015. С. 35–39.  
URL: <http://issledo.ru/wp-content/uploads/2015/01/Sbornik-6-3.pdf>
13. Смирнов А.Д. Расчет спектроскопических постоянных и радиационных параметров для электронных переходов  $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma^+$  молекул CsLi и CsRb // Оптика и спектроскопия. 2016. Т. 121. № 6. С. 839–847.
14. Ghanmi C., Bouzouita H., Berriche H., Ben Ouada H. Theoretical investigation on  $CsLi^+$  and  $CsNa^+$  ionic molecules // J. Molecul. Structure: THEOCHEM. 2006. Vol. 777. Iss. 1-3. P. 81–86. DOI: 10.1016/j.theochem.2006.08.004
15. Berriche H., Ghanmi C., Ben Ouada H. Theoretical study of the electronic states and transition dipole moments of the  $LiK^+$  molecule // J. Mol. Spectr. 2005. Vol. 230. Iss. 2. P. 161–167. DOI: 10.1016/j.jms.2004.11.009
16. Hulbert H.M., Hirschfelder J.O. Potential energy functions for diatomic molecules // J. Chem. Phys. 1941. Vol. 9. P. 61–69.
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. P. 289–296.



19. *Molecular spectra in gases* / E.C. Kemble, R.T. Birge, W.F. Colby, W. Loomis, L. Page. National Research Council, Washington, D.C., 1930. 57 p.

20. *Lahe 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. Iss. 2. P. 111–121. DOI: 10.1016/j.jms.2007.12.003

21. *Кузнецова Л.А., Пазюк Е.А., Столяров А.В.* Радиационные и энергетические свойства двухатомных молекул (банк данных) // *Журнал физической химии.* 1993. Т. 67. № 11. С. 2046–2049.

**Смирнов Александр Давыдович** — канд. хим. наук, доцент кафедры «Химия» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1).

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

Смирнов А.Д. Расчет радиационных параметров молекулярных ионов CsLi<sup>+</sup> и LiK<sup>+</sup> // *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки.* 2017. № 5. С. 67–77. DOI: 10.18698/1812-3368-2017-5-67-77

**COMPUTING RADIATIVE PARAMETERS FOR THE CsLi<sup>+</sup> AND LiK<sup>+</sup> MOLECULAR IONS**

**A.D. Smirnov**

adsmir@mail.ru

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

---

**Abstract**

We computed radiative parameters (Einstein coefficient, absorption oscillator strength, Franck — Condon factors, vibronic transition wavenumbers in  $(2)^2\Sigma^+ - X^2\Sigma^+$  band systems) for the CsLi<sup>+</sup> ( $0 \leq v' \leq 15$ ,  $0 \leq v'' \leq 51$ ) and LiK<sup>+</sup> ( $0 \leq v' \leq 15$ ,  $0 \leq v'' \leq 46$ ) molecular ions, plus radiative lifetimes of excited electron states. We conducted our calculations based on potential energy curves plotted in our work. We solved the radial wave equation numerically in order to determine the vibrational energies and corresponding wave functions required for the computation. This is the first time that these radiative parameters and lifetimes were computed

**Keywords**

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

Received 15.12.2016  
© BMSTU, 2017

---

**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, iss. 13, pp. 133005–133009. DOI: 10.1103/PhysRevLett.101.133005

[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, iss. 2, pp. 219–225. DOI: 10.1007/s00340-009-3407-1

- [3] Aikawa K., Akamatsu D., Hayashi M., Oasa K., Kobayashi J., Naidon P., Kishimoto T., Ueda M., Inouye S. Coherent transfer of photoassociated molecules in to the rovibrational ground state. *Phys Rev. Lett.*, 2010, vol. 105, iss. 20, pp. 203001–203005. DOI: 10.1103/PhysRevLett.105.203001
- [4] Smirnov A.D. Calculation of radiative parameters for the  $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$  transition of cesium dimer. *Journal of Applied Spectroscopy*, 2010, vol. 77, no. 5, pp. 609–614. DOI: 10.1007/s10812-010-9375-8
- [5] Smirnov A.D. Calculation of spectroscopic constants and radiative parameters for  $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$  and  $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ . *Optics and Spectroscopy*, 2010, vol. 109, no. 5, pp. 680–686. DOI: 10.1134/S0030400X10110068
- [6] Smirnov A.D. Calculation of spectroscopic constants and radiative parameters for the  $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$  and  $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  electronic transitions of the lithium dimer. *Optics and Spectroscopy*, 2012, vol. 113, no. 4, pp. 345–352. DOI: 10.1134/S0030400X12080176
- [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, pp. 67–85 (in Russ.).
- [8] Smirnov A.D. Energy and radiation properties of the electronic transition of the cesium and rubidium dimers. *Inzhenernyy zhurnal: nauka i innovatsii* [Engineering Journal: Science and Innovation], 2013, no. 6 (in Russ.). DOI: 10.18698/2308-6033-2013-6-790 Available at: <http://engjournal.ru/catalog/fundamentals/physics/790.html>
- [9] 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
- [10] Smirnov A.D. Calculation of spectroscopic constants and radiative parameters for the  $B^1\Pi_u - X^1\Sigma^+$  electronic transitions of NaK, NaRb, and NaCs molecules. *Optics and Spectroscopy*, 2014, vol. 117, no. 3, pp. 358–365. DOI: 10.1134/S0030400X14080244
- [11] Smirnov A.D. Calculation of radiative parameters for  $B^1\Pi_u - X^1\Sigma^+$  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
- [12] Fedorov V.V., Smirnov A.D. Radiative parameters calculation of  $A^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$  for the  $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma^+$  electronic transition of NaLi molecule. *Sovremennye tendentsii razvitiya nauki i tekhnologii. Sbornik nauchnykh trudov po materialam VI Mezhdunarodnoy nauchno-prakticheskoy konferentsii. Ch. 3* [Current development trends of science and technology. P. 3]. 2015, pp. 35–39 (in Russ.). Available at: <http://issledo.ru/wp-content/uploads/2015/05sbornik-6-3.pdf>
- [13] Smirnov A.D. Calculation of spectroscopic constants and radiative parameters for the  $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma^+$  electronic transitions of the CsLi and CsRb molecules. *Optics and Spectroscopy*, 2016, vol. 121, no. 6, pp. 783–789. DOI: 10.1134/S0030400X16120237

- [14] Ghanmi C., Bouzouita H., Berriche H., Ben Ouada H. Theoretical investigation on CsLi<sup>+</sup> and CsNa<sup>+</sup> ionic molecules. *J. Molecul. Structure: THEOCHEM*, 2006, vol. 777, iss. 1-3, pp. 81–86. DOI: 10.1016/j.theochem.2006.08.004
- [15] Berriche H., Ghanmi C., Ben Ouada H. Theoretical study of the electronic states and transition dipole moments of the LiK<sup>+</sup> molecule. *J. Mol. Spectr.*, 2005, vol. 230, iss. 2, pp. 161–167. DOI: 10.1016/j.jms.2004.11.009
- [16] Hulbert H.M., Hirschfelder J.O. Potential energy functions for diatomic molecules. *J. Chem. Phys.* 1941, vol. 9, pp. 61–69.
- [17] Zулiсke L. Quantenchemie. Ein Lehrgang. Band 1. Grundlagen und allgemeine methoden. Berlin, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1973. 517 s.
- [18] Kratzer A. Die ultraroten rotationsspektren der halogenwasserstoffe. *Z. Phys.*, 1920, vol. 3, pp. 289–296.
- [19] Kemble E.C., Birge R.T., Colby W.F., Loomis W., Page L. Molecular spectra in gases. National Research Council, Washington, D.C., 1930. 57 p.
- [20] 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, iss. 2, pp. 111–121. DOI: 10.1016/j.jms.2007.12.003
- [21] Kuznetsova L.A., Pazyuk E.A., Stolyarov A.V. Radiative and energetic properties of diatomics (data bank). *Zhurnal fizicheskoy khimii*, 1993, vol. 67, no. 11, pp. 2046–2049 (in Russ.).

**Smirnov A.D.** — Cand. Sc. (Chem.), Assoc. Professor of Chemistry Department, Bauman Moscow State Technical University (2-ya Baumanskaya ul. 5, str. 1, Moscow, 105005 Russian Federation).

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

Smirnov A.D. Computing Radiative Parameters for the CsLi<sup>+</sup> and LiK<sup>+</sup> Molecular Ions. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Baumana, Estestv. Nauki* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.], 2017, no. 5, pp. 67–77. DOI: 10.18698/1812-3368-2017-5-67-77