

## Энергетические и радиационные свойства электронного перехода $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ димеров цезия и рубидия

© А.Д. Смирнов

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, 105005, Россия

*Проведен расчет энергетических молекулярных постоянных (колебательных, вращательных, центробежных) и радиационных параметров (коэффициентов Эйнштейна, сил осциллятора, факторов Франка-Кондона), волновых чисел вращательных линий электронноколебательно-вращательного перехода  $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  и радиационных времен жизни для колебательно-вращательных уровней энергии возбужденного состояния димеров цезия и рубидия. Расчеты проведены на основе полуэмпирических потенциальных кривых, построенных в настоящей работе.*

**Ключевые слова:** потенциальная кривая, радиальное волновое уравнение, коэффициент Эйнштейна, сила осциллятора, радиационное время жизни возбужденного состояния.

**Введение.** Интерес к экспериментальному и теоретическому изучению энергетических и радиационных свойств димеров щелочных металлов связан с перспективой их использования для создания лазерных источников непрерывного излучения [1, 2].

В работах [3 — 9] были рассчитаны энергетические молекулярные постоянные (колебательные, вращательные, центробежные) для основных электронных состояний димеров ( $Li_2$ ,  $Na_2$ ,  $K_2$ ,  $Rb_2$ ,  $Cs_2$ ) и смешанных димеров ( $NaLi$ ,  $NaK$ ,  $NaRb$ ,  $NaCs$ ,  $KRb$ ,  $RbCs$ ,  $CsK$ ,  $CsLi$ ,  $RbLi$ ) атомов щелочных металлов и молекулярных ионов ( $Li_2^+$ ,  $Li_2^-$ ,  $Na_2^+$ ,  $K_2^+$ ,  $Cs_2^+$ ).

В [10 — 14] молекулярные постоянные вычислены для возбужденных электронных состояний димеров щелочных металлов. Расчеты молекулярных постоянных проводились квантово-химическим методом на основе полуэмпирических потенциальных кривых. Радиационные параметры (коэффициенты Эйнштейна, силы осциллятора, факторы Франка-Кондона для электронных переходов), времена жизни возбужденных электронных уровней для димеров лития, натрия, калия и цезия рассчитаны в работах [10, 11, 15, 16]. Аналогичная методика также использовалась для расчета молекулярных постоянных димеров  $Cu_2$ ,  $Ag_2$ ,  $Au_2$  [17 — 23] и смешанных димеров  $CuAg$ ,  $CuAu$ ,  $AgAu$  [13, 14] переходных металлов первой группы таблицы элементов Д.И. Менделеева. Радиационные параметры и времена жизни димеров и смешанных димеров переходных металлов рассчитаны в работе [24]. Сравне-

ние результатов расчета молекулярных постоянных и радиационных параметров с экспериментальными данными показало высокую эффективность метода расчета.

В настоящей работе проведены расчеты радиационных параметров для перехода  $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  димеров цезия и рубидия, данные по которым отсутствуют. Системы полос  $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  перехода димеров цезия и рубидия расположены в спектральных областях, соответственно 835 — 695 нм и 709 — 649 нм. Молекулы  $Rb_2$  и  $Cs_2$  — наиболее тяжелые из димеров щелочных металлов. Сложность их экспериментального исследования связана с высокой плотностью уровней энергии, обусловленной низкими значениями частот колебаний и малыми величинами вращательных постоянных. Детальный анализ электронных спектров  $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  перехода димеров цезия и рубидия оказался возможным только с использованием лазерных методик и техники высокого разрешения. Были получены точные молекулярные постоянные [25 — 27], необходимые для построения полуэмпирических потенциальных кривых комбинирующих электронных состояний.

**Построение потенциальных кривых и расчет молекулярных постоянных.** Потенциальные кривые и рассчитанные на их основе молекулярные постоянные для основных электронных состояний димеров цезия и рубидия приведены в работах [5]. При построении потенциалов для возбужденных  $B^1\Pi_u$  электронных состояний, также как и для других димеров щелочных металлов, применялась гибридная потенциальная кривая, состоящая из трех потенциальных функций. Нижний участок потенциальной кривой аппроксимирован функцией возмущенного осциллятора Морзе (ВМ).

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

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

В средней части потенциальной кривой, которая представляет собой экспериментально исследованный диапазон колебательных квантовых чисел, использовался потенциал Ридберга — Клейна — Риса (РКР). Потенциальная кривая РКР не имеет аналитического вида, она строится в виде набора классических поворотных точек  $R_{\max}$  и  $R_{\min}$  для экспериментально изученных колебательных уровней энергии. Область потенциальной кривой при больших значениях межъядерного расстояния аппроксимирована функцией

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

где  $D_e$  — экспериментальная энергия диссоциации;  $C_n$  — параметры функции (2),  $n = 3, 6, 8$ .

Параметры потенциалов ВМ и поворотные точки потенциальных кривых РКР рассчитаны по ранее описанным программам [3, 4]. Параметры функции (2) получены методом наименьших квадратов с помощью поворотных точек  $R_{\max}$  потенциальных кривых РКР и экспериментальных значений энергий диссоциации. Для расчета параметров потенциальных функций ВМ и РКР были использованы экспериментальные колебательные и вращательные молекулярные постоянные [25 — 27]. В табл. 1 приведены рассчитанные поворотные точки потенциальных кривых РКР для  $B^1\Pi_u$  электронного состояния димеров цезия и рубидия.

Для проверки надежности построенных потенциальных кривых проведено сравнение рассчитанных колебательных энергий, вращательных и центробежных постоянных с экспериментальными данными. Колебательные энергии найдены в результате численного решения радиального волнового уравнения на основе построенных потенциальных кривых.

Таблица 1

**Поворотные точки РКР для состояния  $B^1\Pi_u$  димеров цезия и рубидия**

$v$	$E_v^{\text{эксп}}$ , см <sup>-1</sup>	$E_v^{\text{эксп}} \cdot 10^2$ , см <sup>-1</sup>	$R_{\min}$ , Å	$R_{\max}$ , Å	$E_v^{\text{эксп}}$ , см <sup>-1</sup>	$E_v^{\text{эксп}} \cdot 10^2$ , см <sup>-1</sup>	$R_{\min}$ , Å	$R_{\max}$ , Å
	Cs <sub>2</sub>				Rb <sub>2</sub>			
0	17,132	1,0748	4,73833	4,98160	23,709	1,9474	4,38593	4,64499
2	85,324	1,0719	4,59702	5,14327	117,791	1,9276	4,24726	4,82938
4	152,869	1,0685	4,51345	5,24930	210,729	1,9078	4,16894	4,95393
6	219,749	1,0651	4,44876	5,33681	302,523	1,8880	4,11066	5,05898
8	285,956	1,0621	4,39408	5,41390	393,173	1,8682	4,06342	5,15354
10	351,488	1,0593	4,34587	5,48418	482,679	1,8484	4,02341	5,24143
12	416,347	1,0562	4,30251	5,54986	571,041	1,8286	3,98860	5,32469
14	480,534	1,0522	4,26332	5,61258	658,259	1,8088	3,95776	5,40457
16	544,047	1,0471	4,22802	5,67364	744,333	1,7889	3,93007	5,48190
18	606,882	1,0404	4,19649	5,73403	829,263	1,7692	3,90496	5,55726
20	669,063	1,0323	4,16856	5,79446	913,049	1,7494	3,88201	5,63110

Расчет вращательных и центробежных постоянных был проведен по теории возмущений для модели вращающегося осциллятора двухатомной молекулы [28]

$$B_v = \beta \langle v | R^{-2} | v \rangle, \quad (3)$$

$$D_v = \beta^2 \sum_{u \neq v} \frac{\langle u | R^{-2} | v \rangle^2}{(E_u - E_v)}, \quad (4)$$

$$H_v = \beta^3 \sum_{t \neq v} \sum_{u \neq v} \frac{\langle v | R^{-2} | u \rangle \langle u | R^{-2} | t \rangle \langle t | R^{-2} | v \rangle}{(E_u - E_v)(E_t - E_v)} - \beta^2 B_v \sum_{u \neq v} \frac{\langle u | R^{-2} | v \rangle^2}{(E_u - E_v)^2}, \quad (5)$$

где матричный элемент

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

В табл. 2 приведены для сравнения значения рассчитанных колебательных энергий и вращательных постоянных, а также экспериментальные значения.

Стандартные отклонения рассчитанных значений колебательной энергии от экспериментальных данных  $\sigma_E = \left( \sum_{i=1}^n \delta E_i^2 / n \right)^{1/2}$ , ( $n = 21$ )

для димера цезия равно  $0,020 \text{ см}^{-1}$ , для димера рубидия  $0,004 \text{ см}^{-1}$ . Для вращательных постоянных стандартные отклонения, соответственно, равны  $1,2 \cdot 10^{-6}$  и  $2,4 \cdot 10^{-6} \text{ см}^{-1}$ .

Таблица 2

**Результаты расчета колебательных энергий и вращательных постоянных и сравнение с экспериментальными значениями**

$v$	$E_v^{\text{расч}}, \text{ см}^{-1}$	$\delta E_v \cdot 10^3, \text{ см}^{-1}$	$B_v^{\text{расч}} \cdot 10^2, \text{ см}^{-1}$	$\delta B_v^{\text{расч}} \cdot 10^6, \text{ см}^{-1}$	$E_v^{\text{расч}}, \text{ см}^{-1}$	$\delta E_v \cdot 10^3, \text{ см}^{-1}$	$B_v^{\text{расч}} \cdot 10^2, \text{ см}^{-1}$	$\delta B_v^{\text{расч}} \cdot 10^6, \text{ см}^{-1}$
	Cs <sub>2</sub>				Rb <sub>2</sub>			
0	17,333	1	1,0748	2	23,708	1	1,9476	-2
2	85,326	2	1,0719	1	117,789	2	1,9281	-3
4	152,867	-1	1,0685	2	210,728	1	1,9080	-2

6	219,745	-4	1,0651	1	302,524	-1	1,8882	-2
8	285,954	-2	1,0621	1	393,174	-1	1,8684	-2
10	351,490	-2	1,0593	1	482,681	-2	1,8485	-1
12	416,358	7	1,0562	0	571,044	-3	1,8288	-2
14	480,557	19	1,0522	-1	658,263	-4	1,8089	-1
16	544,085	33	1,0471	-1	744,338	-5	1,7891	-2
18	606,932	45	1,0404	0	829,269	-6	1,7693	-1
20	669,072	40	1,0323	2	913,056	-7	1,7495	-1

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

$$E_v = \omega_e(v + 0,5) - \omega_e x_e(v + 0,5)^2 + \dots, \quad (6)$$

$$B_v = B_e - \alpha_e(v + 0,5) + \gamma_e(v + 0,5)^2 + \dots, \quad (7)$$

$$D_v = D_e - \beta_e(v + 0,5) + \delta_e(v + 0,5)^2 + \dots, \quad (8)$$

$$H_v = H_e - \xi_e(v + 0,5) + \varepsilon_e(v + 0,5)^2 + \dots. \quad (9)$$

Полученные из оптимальных аппроксимирующих функций молекулярные постоянные для  $B^1\Pi_u$  состояний  $\text{Cs}_2$  и  $\text{Rb}_2$  приведены в табл. 3, в которой для сопоставления даны и экспериментальные значения. Экспериментальные и рассчитанные частоты колебаний отличаются не более чем на 0,001%, рассчитанные и экспериментальные вращательные постоянные различаются на 0,02%. Разница между значениями рассчитанной центробежной постоянной  $D_e$  и экспериментальной для димера рубидия не превышает 6%.

Полученные на основе потенциальных кривых значения центробежных постоянных  $D_e$  и  $H_e$  также сопоставлены с величинами, рассчитанными на основе экспериментальных колебательных и вращательных постоянных по эмпирическим соотношениям Кратцера [29]

$$D_e = \frac{4B_e^3}{\omega_e^2} \quad (10)$$

$$H_e = \frac{2D_e(12B_e^2 - \alpha_e\omega_e)}{3\omega_e^2}. \quad (11)$$

Значения  $D_e$  и  $H_e$ , рассчитанные по соотношениям (10) и (11) (см. табл. 3), отличаются от полученных с помощью потенциальных кривых, соответственно для  $\text{Cs}_2$  и  $\text{Rb}_2$ , на 0,04 и 1%.

**Расчет радиационных параметров.** Расчет радиационных параметров для  $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  переходов молекул  $\text{Cs}_2$  и  $\text{Rb}_2$  проведен на основе построенных потенциальных кривых. Для электронно-колебательно-вращательного перехода двухатомной молекулы коэффициент Эйнштейна для спонтанного излучения  $A_{v',j',j''}^{v',j',j''}$  ( $\text{с}^{-1}$ ) и сила осциллятора для поглощения  $(f_{v',j',j''}^{v',j',j''})^{\text{погл}}$  (безразмерная величина), связаны с зависимостью дипольного момента электронного перехода от межъядерного расстояния  $D_e R$  (а.е.) и определяются выражениями [31]:

$$A_{v',j',j''}^{v',j',j''} = 2,026 \cdot 10^{-6} \frac{(v_{v',j',j''}^{v',j',j''})^3 (2 - \delta_{0,\Lambda'+\Lambda''})}{(2 - \delta_{0,\Lambda''})} \times \\ \times \left[ \langle \psi_{v',j'}(R) | D_e(R) | \psi_{v'',j''}(R) \rangle \right]^2 \times \frac{S_{j',j''}}{2j'+1}, \quad (12)$$

$$(f_{v',j',j''}^{v',j',j''})^{\text{погл}} = 3,0376 \cdot 10^{-6} \frac{v_{v',j',j''}^{v',j',j''} (2 - \delta_{0,\Lambda'+\Lambda''})}{(2 - \delta_{0,\Lambda''})} \times \\ \times \left[ \langle \psi_{v',j'}(R) | D_e(R) | \psi_{v'',j''}(R) \rangle \right]^2 \times \frac{S_{j',j''}}{2j'+1}, \quad (13)$$

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, равный 1, если  $\Lambda = 0$  и нулю для других значений  $\Lambda$ ;  $v_{v',j',j''}^{v',j',j''}$  — волновое число электронно-колебательно-вращательного перехода ( $\text{см}^{-1}$ );  $\psi_{v',j'}(R), \psi_{v'',j''}(R)$  — колебательно-вращательные волновые функции возбужденного и основного электронных состояний;  $S_{j',j''}$  — фактор Хенля — Лондона.

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

$$q_{v',j',j''}^{v',j',j''} = \left| \int_0^\infty \psi_{v',j'}(R) \psi_{v'',j''}(R) dR \right|^2. \quad (14)$$

**Молекулярные постоянные (см<sup>-1</sup>), рассчитанные на основе потенциальных кривых, и экспериментальные данные для электронного состояния  $B^1\Pi_u$  димеров цезия и рубидия**

Молекулярные постоянные	Молекула $^{133}\text{Cs}_2$	Молекула $^{85}\text{Rb}_2$
$\omega_e$	34,331 34,331	47,470 47,470
$\omega_e x_e$	7,672(-2) 7,642(-2)	0,1430 0,1430
$\omega_e y_e$	-8,06(-4) -7,96(-4)	-8,340 (-7) —
$B_e$	1,075(-2) 1,075(-2)	0,19528 (-1) 0,19523 (-1)
$\alpha_e$	8,01(-6) 8,09(-6)	1,00(-4) 1,00(-4)
$\gamma_e$	-3,04(-6) -3,01(-6)	1,561(-7) —
$D_e$	4,214(-9) — 4,216(-9)*	1,3213(-8) 1,4(-8) 1,3209(-8)*
$H_e$	2,56(-15) 2,64(-15)**	-4,871(-16) -4,914(-16)**

*Примечание.* Первая строка — расчет на основе потенциальных кривых; вторая — экспериментальные данные [25 — 27]; \* — расчет по соотношению (10) с использованием экспериментальных данных; \*\* — расчет по соотношению (11) с использованием экспериментальных данных.

Для расчета волновых чисел электронно-колебательно-вращательных переходов  $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  молекул  $\text{Cs}_2$  и  $\text{Rb}_2$  использовалось выражение

$$v_{v',j';v'',j''}^{\nu} = T_e' + E'(v, j) - E''(v, j), \quad (15)$$

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 значения  $T_e'$  ( $B^1\Pi_u$ ) из работ [26, 27]. Величины  $E'(v, j), E''(v, j)$  и соответствующие им волновые функции  $\psi_{v',j'}(R), \psi_{v'',j''}(R)$  получены в результате численного решения радиального волнового уравнения с использованием эффективного потенциала

$$U^{\text{эфф}}(R) = U(R) + \frac{h}{8\pi^2\mu c} \frac{j(j+1)}{R^2}, \quad (16)$$

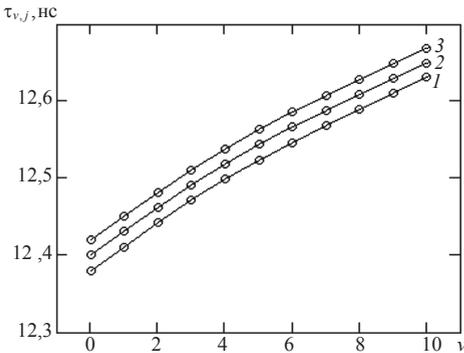
где  $\mu$  — приведенная масса молекулы.

Значения  $\tau_{v',j'}$  для состояния  $B^1\Pi_u$  рассчитаны с использованием коэффициентов Эйнштейна для вращательных линий  $Q$  — ветви переходов  $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  димеров цезия и рубидия

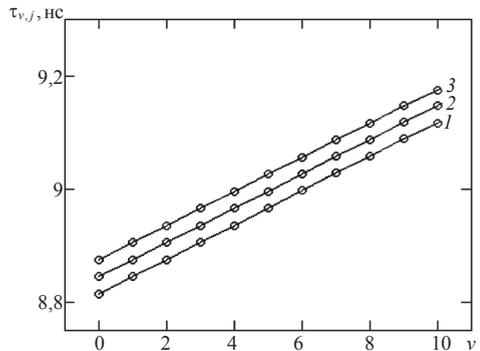
$$\tau_{v',j'} = \left( \sum_{v''=0} A_{v'',j''}^{v',j'} \right)^{-1}. \quad (17)$$

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 (12) — (15) и (17). При расчете  $A_{v'',j''}^{v',j'}$  и  $(f_{v'',j''}^{v',j'})^{\text{погл}}$   $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  перехода молекул  $\text{Cs}_2$  и  $\text{Rb}_2$  использованы зависимости  $D_e(R)$ , рассчитанные квантово-химическим методом [32].

В настоящей работе были рассчитаны радиационные параметры для электронного перехода  $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  в димере цезия ( $0 \leq v' \leq 10$ ,  $j' = 0, 30, 70, 100$ ;  $0 \leq v'' \leq 34$ ) и димере рубидия ( $0 \leq v' \leq 10$ ,  $j' = 0, 30, 70, 100$ ;  $0 \leq v'' \leq 46$ ), а также радиационные времена жизни электронного состояния  $B^1\Pi_u$ . В табл. 4, 5 приведена часть результатов расчета радиационных параметров молекул  $\text{Cs}_2$  и  $\text{Rb}_2$ . На рис. 1 и 2 представлены результаты расчета времен жизни.



**Рис. 1.** Результаты расчета радиационных времен жизни колебательно-вращательных уровней  $B^1\Pi_u$  — состояния молекулы  $\text{Cs}_2$  (1 —  $j = 0$ ; 2 —  $j = 70$ ; 3 —  $j = 100$ )



**Рис. 2.** Результаты расчета радиационных времен жизни колебательно-вращательных уровней  $B^1\Pi_u$  — состояния молекулы  $\text{Rb}_2$  (1 —  $j = 0$ ; 2 —  $j = 70$ ; 3 —  $j = 100$ )

Таблица 4

Радиационные параметры  $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  электронного перехода молекулы  $^{85}\text{Rb}_2$  ( $j'=0$ )

$v'$	$v''=0$	$v''=1$	$v''=2$	$v''=3$	$v''=4$	$v''=5$	$v''=6$	$v''=7$	$v''=8$	$v''=9$
0	4,84(-2) 5,71(+6) 7,97(-2) 14659,9	1,55(-1) 1,80(+7) 2,53(-1) 14602,4	2,38(-1) 2,73(+7) 3,87(-1) 14545,2	2,36(-1) 2,67(+7) 3,81(-1) 14488,2	1,68(-1) 1,88(+7) 2,71(-1) 14431,5	9,28(-2) 1,07(+7) 1,49(-1) 14375,2	4,11(-2) 4,48(+6) 6,56(-2) 14319,1	1,50(-2) 1,62(+6) 2,39(-2) 14263,3	4,63(-3) 4,94(+5) 7,34(-3) 14207,8	1,22(-3) 1,29(+5) 1,92(-3) 14152,6
1	1,31(-1) 1,56(+7) 2,16(-1) 14707,0	1,94(-1) 2,27(+7) 3,18(-1) 14649,6	7,48(-2) 8,63(+6) 1,21(-1) 14592,3	2,40(-4) 2,79(+4) 3,96(-4) 14535,4	7,26(-2) 8,17(+6) 1,17(-1) 14478,7	1,60(-1) 1,78(+7) 2,57(-1) 14422,3	1,65(-1) 1,82(+7) 2,64(-1) 14366,3	1,12(-1) 1,22(+7) 1,79(-1) 14310,5	5,67(-2) 6,08(+6) 8,98(-2) 14254,9	2,26(-2) 2,40(+6) 3,57(-2) 14199,7
2	1,90(-1) 2,28(+7) 3,14(-1) 14753,9	8,60(-2) 1,02(+7) 1,41(-1) 14696,5	6,71(-3) 7,87(+5) 1,10(-2) 14639,2	1,09(-1) 1,26(+7) 1,78(-1) 14582,3	8,65(-2) 9,81(+6) 1,39(-1) 14525,6	3,40(-3) 3,80(+5) 5,44(-3) 14469,2	3,98(-2) 4,41(+6) 6,36(-2) 14413,2	1,27(-1) 1,39(+7) 2,03(-1) 14357,4	1,50(-1) 1,63(+7) 2,39(-1) 14301,9	1,10(-1) 1,17(+7) 1,73(-1) 14246,6
3	1,96(-1) 2,37(+7) 3,25(-1) 14800,6	4,81(-2) 5,80(+5) 8,01(-3) 14743,1	8,98(-2) 1,06(+7) 1,47(-1) 14685,8	6,39(-2) 7,44(+6) 1,04(-1) 14628,9	4,29(-3) 4,99(+5) 7,06(-3) 14572,2	8,98(-2) 1,02(+7) 1,45(-1) 14515,9	7,34(-2) 8,20(+6) 1,18(-1) 14459,8	2,44(-3) 2,71(+5) 3,91(-3) 14403,9	3,83(-2) 4,17(+6) 6,08(-2) 14348,5	1,19(-1) 1,28(+7) 1,88(-1) 14293,3
4	1,62(-1) 1,98(+7) 2,69(-1) 14846,9	1,78(-2) 2,12(+6) 2,90(-2) 14789,4	9,73(-2) 1,16(+7) 1,60(-1) 14732,2	1,22(-4) 1,37(+4) 1,91(-4) 14675,2	8,37(-2) 9,73(+6) 1,36(-1) 14618,6	3,73(-2) 4,27(+6) 6,04(-2) 14562,2	1,20(-2) 1,37(+6) 1,96(-2) 14506,1	8,79(-2) 9,82(+6) 1,41(-1) 14450,3	5,39(-2) 5,94(+6) 8,60(-2) 14394,8	0 0 0 14339,6
5	1,14(-1) 1,41(+7) 1,90(-1) 14892,9	7,17(-2) 8,65(+6) 1,18(-1) 14835,4	3,35(-2) 4,03(+6) 5,54(-2) 14778,2	5,06(-2) 5,97(+6) 8,26(-2) 14721,3	5,09(-2) 5,97(+6) 8,33(-2) 14664,6	1,20(-2) 1,38(+6) 1,94(-2) 14608,2	8,00(-2) 9,15(+6) 1,30(-1) 14552,2	1,27(-2) 1,42(+6) 2,03(-2) 14496,4	2,97(-2) 3,32(+6) 4,77(-2) 14440,8	8,54(-2) 9,39(+6) 1,36(-1) 14385,6
6	7,19(-2) 8,90(+6) 1,20(-1) 14938,7	1,08(-1) 1,32(+7) 1,78(-1) 14881,2	0 0 0 14823,9	8,24(-2) 9,84(+6) 1,35(-1) 14767,0	0 0 0 14710,4	7,20(-2) 8,40(+6) 1,17(-1) 14653,9	1,25(-2) 1,45(+6) 2,04(-2) 14597,9	3,92(-2) 4,47(+6) 6,34(-2) 14542,1	6,13(-2) 6,90(+6) 9,86(-2) 14486,6	1,96(-4) 2,11(+4) 3,04(-4) 14431,4
7	4,15(-2) 5,15(+6) 6,88(-2) 14984,2	1,11(-1) 1,36(+7) 1,83(-1) 14926,7	2,09(-2) 2,52(+6) 3,42(-2) 14869,4	4,65(-2) 5,61(+6) 7,67(-2) 14812,5	3,40(-2) 4,03(+6) 5,55(-2) 14755,8	4,00(-2) 4,72(+6) 6,55(-2) 14699,5	2,05(-2) 2,38(+6) 3,33(-2) 14643,4	5,85(-2) 6,75(+6) 9,51(-2) 14587,6	4,32(-4) 5,01(+4) 7,10(-4) 14532,1	6,29(-2) 7,08(+6) 1,01(-1) 14476,8
8	2,25(-2) 2,79(+6) 3,70(-2) 15029,3	9,10(-2) 1,12(+7) 1,50(-1) 14971,8	5,95(-2) 7,28(+6) 9,81(-2) 14914,6	6,02(-3) 7,39(+5) 1,00(-2) 14857,7	6,83(-2) 8,21(+6) 1,12(-1) 14801,0	1,33(-4) 1,71(+4) 2,36(-4) 14744,6	6,35(-2) 7,46(+6) 1,04(-1) 14688,6	2,03(-3) 2,38(+5) 3,34(-3) 14632,8	5,44(-2) 6,26(+6) 8,84(-2) 14577,2	2,18(-2) 2,47(+6) 3,52(-2) 14522,0
9	1,16(-2) 1,44(+6) 1,89(-2) 15074,2	6,47(-2) 8,05(+6) 1,07(-1) 15016,7	8,33(-2) 1,03(+7) 1,37(-1) 14959,5	4,20(-3) 5,07(+5) 6,84(-3) 14902,6	4,96(-2) 6,01(+6) 8,18(-2) 14845,9	2,57(-2) 3,06(+6) 4,20(-2) 14789,5	3,13(-2) 3,72(+6) 5,14(-2) 14733,4	2,78(-2) 3,24(+6) 4,52(-2) 14677,6	3,65(-2) 4,24(+6) 5,95(-2) 14622,1	1,32(-2) 1,2(+6) 2,14(-2) 14566,9
10	5,74(-3) 7,15(+5) 9,38(-3) 15118,8	4,17(-2) 5,20(+6) 6,88(-2) 15061,4	8,45(-2) 1,05(+7) 1,40(-1) 15004,1	3,06(-2) 3,75(+6) 5,03(-2) 14947,2	1,31(-2) 1,60(+6) 2,17(-2) 14890,5	5,76(-2) 6,94(+6) 9,46(-2) 14834,2	0 0 0 14778,1	5,61(-2) 6,63(+6) 9,17(-2) 14722,3	0 0 0 14666,8	5,51(-2) 6,37(+6) 8,94(-2) 14611,5

Примечание. Первая строка —  $q_{v'v''}$ ; вторая — коэффициенты Эйнштейна  $A_{v'v''}(c^{-1})$ ; третья — силы осциллятора  $f_{v'v''}^{\text{полн}}$ ; четвертая — волновые числа электронно-колебательных переходов  $\nu_{v'v''}$  ( $\text{см}^{-1}$ ). Для электронно-колебательных переходов, которым соответствуют значения  $q_{v'v''} \leq 0,0001$ , приведены величины  $q_{v'v''}$ ,  $A_{v'v''}$  и  $f_{v'v''}^{\text{полн}}$  равные нулю.

**Радиационные параметры  $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  электронного перехода молекулы  $\text{CS}_2(j' = 0)$**

$v'$	$v'' = 0$	$v'' = 1$	$v'' = 2$	$v'' = 3$	$v'' = 4$	$v'' = 5$	$v'' = 6$	$v'' = 7$	$v'' = 8$	$v'' = 9$
0	1,99(-1)	3,19(-1)	2,63(-1)	1,47(-1)	6,13(-2)	2,02(-2)	5,44(-3)	1,22(-3)	2,30(-4)	0
	1,61(+7)	2,55(+7)	2,08(+7)	1,15(+7)	4,76(+6)	1,56(+6)	4,15(+5)	9,22(+4)	1,74(+4)	0
	2,84(-1)	4,52(-1)	3,72(-1)	2,07(-1)	8,62(-2)	2,83(-2)	7,60(-3)	1,70(-3)	3,22(-4)	0
	13040,1	12998,3	12956,6	12915,1	12873,7	12832,5	12791,5	12750,6	12709,9	12669,4
1	3,33(-1)	7,70(-2)	2,04(-2)	1,58(-1)	1,99(-1)	1,35(-1)	6,24(-2)	2,17(-2)	6,01(-3)	1,36(-3)
	2,71(+7)	6,21(+6)	1,63(+6)	1,25(+7)	1,56(+7)	1,04(+7)	4,79(+6)	1,65(+6)	4,53(+5)	1,02(+5)
	4,75(-1)	1,10(-1)	2,90(-2)	2,24(-1)	2,80(-1)	1,89(-1)	8,74(-2)	3,03(-2)	8,36(-3)	1,89(-3)
	13074,3	13032,5	12990,8	12949,2	12907,9	12866,7	12825,7	12784,8	12744,1	12703,6
2	2,70(-1)	2,63(-2)	1,67(-1)	3,32(-1)	2,64(-2)	1,41(-1)	1,67(-1)	1,10(-1)	4,94(-2)	1,67(-2)
	2,22(+7)	2,14(+6)	1,35(+7)	2,65(+6)	2,09(+6)	1,10(+7)	1,29(+7)	8,42(+6)	3,76(+6)	1,26(+6)
	3,87(-1)	3,75(-2)	2,38(-1)	4,71(-2)	3,75(-2)	1,98(-1)	2,35(-1)	1,54(-1)	6,90(-2)	2,33(-2)
	13108,3	13066,5	13024,8	12983,3	12941,9	12900,7	12859,7	12818,8	12778,1	12737,6
3	1,41(-1)	1,80(-1)	2,84(-2)	7,69(-2)	1,09(-1)	3,93(-3)	5,39(-2)	1,45(-1)	1,42(-1)	8,31(-2)
	1,17(+7)	1,47(+7)	2,30(+6)	6,18(+6)	8,66(+6)	3,10(+5)	4,21(+6)	1,12(+7)	1,08(+7)	6,30(+6)
	2,03(-1)	2,58(-1)	4,05(-2)	1,09(-1)	1,54(-1)	5,56(-3)	7,59(-2)	2,04(-1)	1,98(-1)	116(-1)
	13142,2	13100,3	13048,6	13017,1	12975,8	12934,6	12893,5	12852,7	12811,9	12771,5
4	5,35(-1)	2,11(-1)	3,90(-2)	1,06(-1)	4,58(-3)	1,08(-1)	4,95(-2)	4,56(-3)	9,08(-2)	1,45(-1)
	4,46(+6)	1,74(+7)	3,19(+6)	8,54(+6)	3,68(+5)	8,60(+6)	3,89(+6)	3,56(+5)	7,01(+6)	1,11(+7)
	7,70(-2)	3,02(-1)	5,58(-2)	1,50(-1)	6,51(-3)	1,53(-1)	6,98(-2)	6,42(-3)	1,27(-1)	2,03(-1)
	13175,9	13134,0	13092,3	13050,8	13009,4	12968,2	12927,2	12886,4	12845,7	12805,2
5	1,54(-2)	1,30(-1)	1,67(-1)	8,90(-4)	1,10(-1)	1,43(-2)	5,49(-2)	9,00(-2)	6,79(-3)	3,63(-2)
	1,29(+6)	1,08(+7)	1,37(+7)	7,25(+4)	8,91(+6)	1,15(+6)	4,35(+6)	7,06(+6)	5,28(+5)	2,80(+6)
	2,21(-2)	1,87(-1)	2,39(-1)	1,27(-3)	1,57(-1)	2,04(-2)	7,77(-2)	1,27(-1)	9,56(-3)	5,09(-2)
	13209,4	13167,6	13125,9	13084,3	13042,9	13001,8	12960,8	12919,9	12879,2	12838,7
6	3,39(-3)	5,26(-2)	1,76(-1)	7,79(-2)	3,89(-2)	5,91(-2)	5,86(-2)	9,61(-3)	9,14(-2)	3,85(-2)
	2,87(+5)	4,40(+6)	1,46(+7)	6,41(+6)	3,17(+6)	4,77(+6)	4,68(+6)	7,61(+5)	7,17(+6)	2,99(+6)
	4,90(-3)	7,58(-2)	2,54(-1)	1,12(-1)	5,56(-2)	8,42(-2)	8,31(-2)	1,36(-2)	1,29(-1)	5,41(-2)
	13242,8	13200,9	13159,2	13117,7	13076,3	13035,1	12994,1	12953,2	12912,6	12872,0
7	5,60(-4)	1,52(-2)	1,02(-1)	1,71(-1)	1,47(-2)	8,17(-2)	1,22(-2)	8,41(-2)	1,56(-3)	6,17(-2)
	4,81(+4)	1,28(+7)	8,50(+6)	1,42(+7)	1,21(+6)	6,64(+6)	9,84(+5)	6,71(+6)	1,23(+5)	4,83(+6)
	8,19(-4)	2,19(-2)	1,46(-1)	2,46(-1)	2,11(-2)	1,17(-1)	1,74(-2)	1,19(-1)	2,20(-3)	8,70(-2)
	13275,9	13234,1	13192,4	13150,9	13109,5	13068,3	13027,3	12986,4	12945,7	12905,2
8	0	3,15(-3)	3,81(-2)	1,44(-1)	1,26(-1)	8,50(-4)	9,03(-2)	6,60(-4)	7,46(-2)	2,31(-2)
	0	2,68(+5)	3,21(+6)	1,20(+7)	1,04(+7)	6,97(+4)	7,32(+6)	5,33(+4)	5,94(+6)	1,82(+6)
	0	4,56(-3)	5,51(-2)	2,07(-1)	1,80(-1)	1,22(-3)	1,29(-1)	9,43(-4)	1,06(-1)	3,26(-2)
	13308,9	13267,1	13225,4	13183,9	13142,5	13101,3	13060,3	13019,5	12978,8	12938,2
9	0	4,40(-4)	9,79(-3)	7,02(-2)	1,64(-1)	6,74(-2)	2,25(-2)	6,65(-2)	1,94(-2)	4,42(-2)
	0	3,79(+4)	8,31(+5)	5,91(+6)	1,37(+7)	5,56(+6)	1,84(+6)	5,38(+6)	1,56(+6)	3,51(+6)
	0	6,43(-4)	1,42(-2)	1,01(-1)	2,36(-1)	9,66(-2)	3,21(-2)	9,48(-2)	2,76(-3)	6,26(-2)
	13341,8	13299,9	13258,3	13216,8	13175,4	13134,2	13093,2	13052,3	13011,6	12971,1
10	0	0	1,66(-3)	2,22(-2)	1,05(-1)	1,57(-1)	2,20(-2)	5,28(-2)	3,19(-2)	4,69(-2)
	0	0	1,42(+5)	1,88(+6)	8,84(+6)	1,30(+7)	1,81(+6)	4,31(+6)	2,58(+6)	3,76(+6)
	0	0	2,41(-3)	3,22(-2)	1,52(-1)	2,26(-1)	3,15(-2)	7,54(-2)	4,54(-2)	6,67(-2)
	13374,5	13332,6	13290,9	13249,4	13208,1	13166,9	13125,8	13084,9	13044,3	13003,8

*Примечание.* Первая строка —  $q_{v''}$ ; вторая — коэффициенты Эйнштейна  $A_{v''v'}(\text{с}^{-1})$ ; третья — силы осциллятора  $f_{v''v'}^{\text{полн}}$ ; четвертая — волновые числа электронно-колебательных переходов  $\nu_{v''v'}(\text{см}^{-1})$ . Для электронно-колебательных переходов, которым соответствуют значения  $q_{v''} \leq 0,0001$ , приведены величины  $q_{v''}$ ,  $A_{v''v'}$  и  $f_{v''v'}^{\text{полн}}$  равные нулю.

**Обсуждение результатов.** Экспериментальные и теоретические значения радиационных параметров для электронного перехода  $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  и времена жизни возбужденного состояния для димеров цезия и рубидия в литературе отсутствуют. Как видно на рис. 1 и 2, радиационные времена жизни возбужденного состояния слабо зависят как от колебательного, так и вращательного квантовых чисел. При возрастании колебательного квантового числа от  $v = 0$  до  $v = 10$  времена жизни  $\text{Cs}_2$  и  $\text{Rb}_2$  возрастают на  $\sim 0,3$  нс ( $\sim 3\%$ ). При изменении вращательного квантового числа от  $j = 0$  до  $j = 100$  времена жизни увеличиваются на  $\sim 0,1$  нс ( $\sim 1\%$ ). Слабое влияние колебательного и вращательного квантовых чисел на времена жизни димеров цезия и рубидия можно объяснить малыми значениями колебательных  $\omega_e^{\text{эксп}}(^{133}\text{Cs}_2) = 34,331 \text{ см}^{-1}$ , ( $\omega_e^{\text{эксп}}(^{85}\text{Rb}_2) = 47,470 \text{ см}^{-1}$ ) и вращательных  $B_e^{\text{эксп}}(^{133}\text{Cs}_2) = 0,01075 \text{ см}^{-1}$ , ( $B_e^{\text{эксп}}(^{85}\text{Rb}_2) = 0,019523 \text{ см}^{-1}$ ) молекулярных постоянных (см. табл. 3), что связано с большими массами этих димеров. Для самого легкого из димеров щелочных металлов, димера лития, экспериментальное значение колебательной постоянной ( $\omega_e^{\text{эксп}}(^7\text{Li}_2) = 270,696 \text{ см}^{-1}$ ) больше, чем у димеров рубидия и цезия, соответственно, в 5 и 8 раз. Вращательная постоянная димера лития ( $B_e^{\text{эксп}}(^7\text{Li}_2) = 0,55743 \text{ см}^{-1}$ ) больше в 28 и 50 раз по сравнению с  $\text{Rb}_2$  и  $\text{Cs}_2$ , поэтому влияние колебательного и вращательного квантовых чисел на время жизни  $B^1\Pi_u$  состояния у  $\text{Li}_2$  более значительно. При изменении от  $v = 0$  до  $v = 10$  время жизни  $\text{Li}_2$  возрастает на  $\sim 0,7$  нс ( $\sim 9\%$ ), а при изменении от  $j = 0$  до  $j = 100$  время жизни увеличивается на  $\sim 0,4$  нс ( $\sim 4\%$ ) [10].

**Заключение.** Адекватность построенных в данной работе полуэмпирических потенциальных кривых для димеров цезия и рубидия подтверждена хорошо согласующимися молекулярными постоянными, рассчитанными на их основе, и экспериментальными данными. Рассчитанные с помощью потенциальных кривых радиационные параметры  $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  перехода и времена жизни возбужденного электронного состояния получены впервые. Изучено влияние колебательного ( $0 \leq v \leq 10$ ) и вращательного ( $0 \leq j \leq 100$ ) квантовых чисел на времена жизни и дано объяснение полученной слабой зависимости.

Полные данные по полученным в данной работе радиационным параметрам электронного перехода  $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  для димеров цезия ( $0 \leq v' \leq 10$ ;  $0 \leq v'' \leq 34$ ;  $0 \leq j \leq 100$ ) и рубидия ( $0 \leq v' \leq 10$ ;  $0 \leq v'' \leq 46$ ;  $0 \leq j \leq 100$ ) могут быть получены от автора.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Johnson D.E., Eden I.G. Continua in the visible absorption spectrum of  $K_2$ . *J. Opt. Soc. Am.*, 1985, vol. 2(5), pp. 721 — 728.
- [2] Ветчинкин С.И., Уманский И.М. Диффузные полосы в  $1^1B_u^+ - 2^3\Pi_g$  спектрах димеров щелочных металлов. *Опт. и спектр.*, 1991, т. 72, с. 29 — 33.
- [3] Смирнов А.Д. Потенциальные кривые основных электронных состояний димеров натрия, калия, цезия. *Опт. и спектр.*, 1996, № 3, с. 390 — 396. Smirnov A.D. Potential curves of the ground electronic States of dimers of sodium, potassium and cesium. *Optics and Spectroscopy.*, 1996, vol. 81(3), pp. 352 — 357.
- [4] Смирнов А.Д. Факторы Франка — Кондона и потенциальные кривые комбинирующих состояний  $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$  перехода димера цезия. *Опт. и спектр.* 1995, № 4, с. 615 — 621.
- [5] Смирнов А.Д. Расчет молекулярных постоянных для основных электронных состояний димеров щелочных металлов на основе комбинированных потенциальных кривых. *Журнал физ. химии*, 2002, № 2, с. 284 — 290. Smirnov A.D. Calculation of molecular constants for the ground electronic states of alkali metal dimers based on combined potential energy curves. *Russian Journal of Physical Chemistry*, 2002, vol. 76(2), pp. 224 — 230.
- [6] Смирнов А.Д. Расчет спектроскопических постоянных для основных электронных состояний гетероядерных двухатомных молекул щелочных металлов. *Журнал физ. химии*, 2003, № 3, с. 478 — 483. Smirnov A.D. Calculation of molecular constants for heteronuclear alkali metal diatomic molecules in the ground electronic states. *Russian Journal of Physical Chemistry*, 2003, vol. 77(3), pp. 413 — 418.
- [7] Смирнов А.Д. Расчет спектроскопических постоянных для основных электронных состояний молекул KRb и RbCs. *Журнал структур. химии*, 2003, № 5, с. 828 — 834. Smirnov A.D. Calculation of spectroscopic constants for the ground electronic states of KRb and RbCs molecules. *Journal of Structural Chemistry*, 2003, vol. 44(5), pp. 757 — 762.
- [8] Смирнов А.Д. Расчет спектроскопических постоянных для основных электронных состояний молекул CsK, CsLi и RbLi. *Журнал структур. химии*, 2007, № 1, с. 27 — 32. Smirnov A.D. Calculation of spectroscopic constants for the ground electronic states of CsK, CsLi and RbLi molecules. *Journal of Structural Chemistry*, 2007, vol. 48(1), pp. 21 — 27.
- [9] Смирнов А.Д. Квантово-химический расчет молекулярных постоянных для димеров, смешанных димеров и молекулярных ионов атомов щелочных металлов. *Сб. науч. тр. XVI Межд. науч.-техн. конф. «Лазеры в науке, технике, медицине»*. Москва, МНТОРЭС им. А. С. Попова, 2005, 232 с.
- [10] Смирнов А.Д. Расчет спектроскопических постоянных и радиационных параметров  $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$  и  $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  электронных переходов димера лития. *Опт. и спектр.*, 2012, № 4, с. 387 — 394. Smirnov A. D. Calculation of spectroscopic constants and radiative parameters for  $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$  and  $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  transitions of lithium dimer. *Optics and Spectroscopy*, 2012, vol. 113(4), pp. 345 — 352.
- [11] 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. *Опт. и спектр.*, 2010, №5, с. 739 — 745. Smirnov A.D. Calculation of spectroscopic constants and radiative parameters for  $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$  and  $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  transitions of sodium dimer. *Optics and Spectroscopy*, 2010, vol. 109(5), pp. 680 — 686.

- [12] Смирнов А.Д. Расчет молекулярных постоянных для  $X^1\Sigma_g^+$ ,  $A^1\Sigma_u^+$ ,  $B^1\Pi_u$ ,  $a^3\Sigma_u^+$  состояний  $^{39}\text{K}_2$ . *Онм. и спектр.*, 2002, № 5, с. 739 — 743. Smirnov A.D. Calculation of Molecular Constants for the  $X^1\Sigma_g^+$ ,  $A^1\Sigma_u^+$ ,  $B^1\Pi_u$ ,  $a^3\Sigma_u^+$  electronic states of  $^{39}\text{K}_2$ . *Optics and Spectroscopy*, 2002, vol. 93(5), pp. 678 — 681.
- [13] Смирнов А.Д. Расчет молекулярных постоянных для электронных состояний  $B^1\Pi_u$ ,  $C^1\Pi_u$ ,  $(1)^1\Pi_g$ ,  $(2)^1\Sigma_g^+$  димера рубидия. *Журнал физ. химии*, 2011, т. 85, № 6, с. 1127 — 1131. Smirnov A.D. Calculating the molecular constants for the  $B^1\Pi_u$ ,  $C^1\Pi_u$ ,  $(1)^1\Pi_g$ ,  $(2)^1\Sigma_g^+$  electronic states of the rubidium dimer. *Russian Journal of Physical Chemistry A*. 2011, vol. 85(6), pp. 1026 — 1030.
- [14] Смирнов А.Д. Расчет спектроскопических постоянных для электронных состояний  $A^1\Sigma_u^+$ ,  $B^1\Pi_u$ ,  $C^1\Pi_u$ ,  $D^1\Sigma_u^+$ ,  $E^1\Sigma_u^+$  димера цезия. *Онм. и спектр.* 2007, №1, с. 23 — 27. Smirnov A.D. Calculation of spectroscopic constants for the electronic states  $A^1\Sigma_u^+$ ,  $B^1\Pi_u$ ,  $C^1\Pi_u$ ,  $D^1\Sigma_u^+$ ,  $E^1\Sigma_u^+$  of the cesium dimer. *Optics and Spectroscopy*, 2007, vol. 102(1), pp. 18 — 22.
- [15] Смирнов А.Д. Расчет радиационных параметров для  $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$  и  $B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$ , электронных переходов димера калия. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естеств. науки*, 2013, № 2, с. 83 — 101.
- [16] Смирнов А.Д. Расчет радиационных параметров  $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$  перехода димера цезия. *Журнал прикл. спектроскопии*, 2010, № 5, с. 661 — 667. 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(5), pp. 609 — 614.
- [17] Смирнов А.Д. Потенциальная кривая основного электронного состояния димера меди. *Журнал физ. химии*, 1999, №8, с. 1404 — 1410. Smirnov A.D. Potential curve of the ground electronic state copper dimer. *Russian Journal of Physical Chemistry*, 1999, vol. 73(8), pp. 1255 — 1260.
- [18] Смирнов А.Д. Потенциальные кривые электронных состояний  $\text{Ag}_2$ . *Журнал физ. химии*, 2000, № 7, с. 1266 — 1272. Smirnov A.D. The Potential curves of the electronic states of  $\text{Ag}_2$  molecule. *Russian Journal of Physical Chemistry*, 2000, vol. 74(7), pp. 1137 — 1143.
- [19] Смирнов А.Д. Потенциальные кривые димера золота. *Журнал физ. химии*, 2000, №10, с. 1823 — 1827. Smirnov A.D. Potential energy curves of gold dimer. *Russian Journal of Physical Chemistry*, 2000, vol. 74(10), pp. 1655 — 1659.
- [20] Смирнов А.Д. Расчет спектроскопических постоянных двухатомных молекул на основе потенциальных кривых возмущенного осциллятора Морзе. *Онм. и спектр.*, 2000, № 2, с. 223 — 227. Smirnov A.D. Calculation of spectroscopic constants of diatomic molecules with the help of the potential functions of the Perturbed Morse Oscillator. *Optics and Spectroscopy*, 2000, vol. 89(2), pp. 200 — 204.
- [21] Смирнов А.Д. Расчет молекулярных постоянных для основных и возбужденных электронных состояний молекул  $\text{CuAg}$  и  $\text{CuAu}$ . *Журнал физ. химии*, 2003, №7, с. 1254 — 1259. Smirnov A.D. Molecular constant calculations for  $\text{CuAg}$  and  $\text{CuAu}$  in the ground and excited electronic states. *Russian Journal of Physical Chemistry*, 2003, vol. 77(7), pp. 1124 — 1129.
- [22] Смирнов А.Д. Квантово-химический расчет молекулярных постоянных для основных и возбужденных состояний смешанных димеров атомов переходных металлов первой группы периодической таблицы элементов. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естеств. науки*, 2004, № 1, с. 72 — 86.
- [23] Смирнов А.Д. Расчет спектроскопических постоянных и силы электронного перехода  $A0^+ - X^1\Sigma_g^+$  молекулы  $\text{AgAu}$ . *Журнал прикл. спектроскопии*, 2005, №2, с. 176 — 180. Smirnov A.D. Calculation of spectroscopic constants

- and the electronic strength of the  $A0^+ - X^1\Sigma_g^+$  transition for AgAu molecule. *Journal of Applied Spectroscopy*, 2005, vol. 72, pp. 233 — 238.
- [24] 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, 26 — 28 января 2011 г., МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2011.
- [25] Caldwell C.D., Engelke F., Hage H. High resolution spectroscopy in supersonic nozzle beam: the  $Rb_2 B^1\Pi_u - X^1\Sigma_g^+$  band system. *Chem. Phys.*, 1980, vol. 54, pp. 21 — 31.
- [26] Amiot C. Laser-induced fluorescence of  $Rb_2$ : The  $(1)^1\Sigma_g^+$  (X),  $(2)^1\Sigma_g^+$ ,  $(1)^1\Pi_u$  (B),  $(1)^1\Pi_g$ ,  $(2)^1\Pi_u$  (C) electronic states. *J. Chem. Phys.*, 1990, vol. 93, pp. 8591 — 8694.
- [27] Diemer W., Duchowicz R., Ertel M., Mehdizadeh E., Demtroder W. Doppler-free polarization spectroscopy of the  $B^1\Pi_u$  state of  $Cs_2$ . *Chem. Phys. Lett.*, 1989, vol. 164, pp. 419 — 426.
- [28] Цюлике Л. *Квантовая химия. Т. I. Основы и общие методы*. Москва, Мир, 1976, 512 с.
- [29] Kratzer A. Die ultraroten rotationspektren der halogenwasserstoffe. *Z. Phys.*, 1920, vol. 3, pp. 289 — 309.
- [30] Kemble E.C., Birge R.T., Colby W.F. et al. *Molecular Spectra in Gases*. National Research Council, Washington, D.C., 1930, p. 57.
- [31] Laher R.R., Khakoo M.A. Antic-Jovanovic A. Radiative transition parameters for the  $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$  bands system of  $^{107, 109}Ag_2$ . *J. Mol. Spectr.*, 2008, vol. 248, pp. 111 — 121.
- [32] Allouche A.R., Aubert-Frecon M. Transition dipole moments between the low lying states of the  $Rb_2$  and  $Cs_2$  molecules. *J. Chem. Phys.*, 2012, vol. 136, pp. 114302 — 114318.

Статья поступила в редакцию 26.06.2013

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

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>

**Смирнов Александр Давыдович** родился в 1946 г., окончил МГУ им. М.В. Ломоносова в 1969 г. Канд. хим. наук, доцент кафедры «Химия» МГТУ им. Н.Э. Баумана. Автор более 60 научных работ в области квантовой химии и молекулярной спектроскопии.